

**ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ
ΣΧΟΛΗ ΜΗΧΑΝΟΛΟΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ
ΤΟΜΕΑΣ ΘΕΡΜΟΤΗΤΑΣ**



ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

**ΠΡΟΣΔΙΟΡΙΣΜΟΣ ΘΕΣΗΣ ΔΙΕΠΙΦΑΝΕΙΑΣ
ΣΤΕΡΕΟΥ – ΥΓΡΟΥ, ΣΕ ΥΛΙΚΟ ΑΛΛΑΓΗΣ ΦΑΣΗΣ ΜΕ
ΤΟ ΕΜΠΟΡΙΚΟ ΠΑΚΕΤΟ FLUENT**

ΕΠΙΒΛΕΠΩΝ : ΤΖΙΒΑΝΙΔΗΣ ΧΡΗΣΤΟΣ

**Δρ. Μηχανολόγος Μηχανικός
Λέκτορας Ε.Μ.Π.**

ΟΝΟΜΑΤΕΠΩΝΥΜΟ : ΡΙΖΟΣ ΝΙΚΟΛΑΟΣ

ΑΡΙΘΜΟΣ ΜΗΤΡΩΟΥ : 0210 4644

ΕΞΑΜΗΝΟ / ΚΥΚΛΟΣ ΣΠΟΥΔΩΝ : 10^ο / ΕΝΕΡΓΕΙΑΚΟΣ

Περίληψη

Η διπλωματική εργασία ασχολείται με τα υλικά αλλαγής φάσης, συγκεκριμένα γίνεται μια προσομοίωση ενός φαινομένου τήξης και στερεοποίησης του υλικού αλλαγής φάσης το οποίο ευρίσκεται στο εσωτερικό ενός κυλίνδρου με μονωμένα τοιχώματα.

Στόχος της διπλωματικής εργασίας είναι ο εντοπισμός της θέσης της διεπιφάνειας αλλαγής φάσης του υλικού καθώς αυτό βρίσκεται σε στερεά κατάσταση στο εσωτερικό του κυλίνδρου και θερμαίνεται από το ένα άκρο του, με θερμοκρασία μεγαλύτερη της θερμοκρασίας τήξης του, οπότε και τήκεται σταδιακά .

Για την κατασκευή της γεωμετρίας και του υπολογιστικού πλέγματος, χρησιμοποιείται το σχεδιαστικό πακέτο Gambit, τα δεδομένα από το σχεδιαστικό πακέτο εισάγονται στο υπολογιστικό πακέτο Fluent όπου πραγματοποιούνται οι απαιτούμενοι υπολογισμοί.

Ακολουθεί μια σύντομη περιγραφή των περιεχομένων κάθε κεφαλαίου :

Κεφάλαιο 1^ο : Στο πρώτο κεφάλαιο γίνεται μια αναφορά στα βασικά γνωρίσματα των υλικών αλλαγής φάσης και παρατίθενται οι κυριότερες ιδιότητές τους.

Κεφάλαιο 2^ο : Στο δεύτερο κεφάλαιο περιγράφονται οι υπολογιστικές μέθοδοι που εφαρμόζονται για την αντιμετώπιση φαινομένων στερεοποίησης και τήξης που συμβαίνουν στα υλικά αλλαγής φάσης.

Κεφάλαιο 3^ο : Στο τρίτο κεφάλαιο γίνεται αναφορά στις βασικότερες λειτουργίες του σχεδιαστικού πακέτου Gambit, ενώ παράλληλα αναφέρονται τα βήματα κατασκευής της γεωμετρίας και του υπολογιστικού πλέγματος του κυλίνδρου.

Κεφάλαιο 4^ο : Στο τέταρτο κεφάλαιο περιγράφεται ο τρόπος αντιμετώπισης προβλημάτων τήξης και στερεοποίησης με το υπολογιστικό πακέτο Fluent, επιπλέον αναφέρονται αναλυτικά όλες οι διεργασίες που πραγματοποιήθηκαν για την προσομοίωση του φαινομένου

Κεφάλαιο 5^ο : Στο πέμπτο κεφάλαιο πραγματοποιούνται διάφορα υπολογιστικά σενάρια για την εύρεση της θέσης της διεπιφάνειας αλλαγής φάσης του υλικού. Η παραμετρική μελέτη και τα αποτελέσματά της θίγονται στο τέλος του κεφαλαίου.

Ευχαριστίες

Στο σημείο αυτό θα ήθελα να ευχαριστήσω όλους όσους συνέβαλλαν στην ολοκλήρωση της διπλωματικής εργασίας. Συγκεκριμένα τον επιβλέποντα, κ. Χ. Τζιβανίδη, Λέκτορα Ε.Μ.Π., για τις πληροφορίες που μου παρείχε σχετικά με τη διπλωματική εργασία.

Ευχαριστώ ακόμη, ιδιαίτερα, τον κ. Λ. Κραβαρίτη, Υποψήφιο Διδάκτορα Ε.Μ.Π., για την ουσιαστική καθοδήγησή, την ενθάρρυνση και τον χρόνο που μου προσέφερε για την επιτυχή ολοκλήρωση της διπλωματικής εργασίας.

Περιεχόμενα

Κεφάλαιο 1°

Εισαγωγή στα Υλικά Αλλαγής Φάσης (P.C.M.)

1.1 Εισαγωγή	1
1.2 Βασικές αρχές θερμοδυναμικής	2
1.2.1 Αποθήκευση θερμότητας ως αισθητή θερμότητα	2
1.2.2 Αποθήκευση θερμότητας ως Λανθάνουσα Θερμότητα	2
1.3 Φυσικές τεχνικές και οικονομικές ιδιότητες για τα P.C.M.	4
1.4 Κατηγοριοποίηση των P.C.M.	6
1.4.1 Εισαγωγή	6
1.4.2 Ανόργανα υλικά	6
1.4.3 Οργανικά υλικά	8
1.4.4 Μίξη οργανικών και ανόργανων υλικών	9
1.5 Προσέγγιση για την επίλυση προβλημάτων που αφορούν τα υλικά των P.C.M.	10
1.5.1 Εισαγωγή	10
1.5.2 Διαχωρισμός φάσεων	10
1.5.3 Το φαινόμενο της υπέρψυξης - υπόψυξης	11
1.5.4 Μικρή τιμή της θερμικής αγωγιμότητας	13
1.5.5 Τοποθέτηση P.C.M. σε κάψουλες και σύνθετα υλικά	13
1.5.6 Συμβατότητα των P.C.M. με άλλα υλικά	15
1.5.7 Σταθερότητα θερμικών ιδιοτήτων των P.C.M. σε κυκλική φόρτιση	15

Κεφάλαιο 2°

Υπολογιστικές μέθοδοι στα Υλικά Αλλαγής Φάσης (P.C.M.)

2.1 Εισαγωγή	16
2.2 Αναλυτικά μοντέλα μετάδοσης θερμότητας σε P.C.M.	17
2.2.1 Αναλυτικό μοντέλο για τη θέρμανση και ψύξη ημιάπειρης επιφάνειας P.C.M. (1-D)	17
2.2.2 Αναλυτικό μοντέλο για αποθήκευση θερμότητας με P.C.M. (2-D & 3-D)	19
2.3 Υπολογιστικά μοντέλα μετάδοσης θερμότητας σε P.C.M.	22
2.3.1 Εισαγωγή	22
2.3.2 Μέθοδος πεπερασμένων διαφορών σε P.C.M.	22
2.3.3 Μέθοδος ενθαλπίας σε P.C.M.	24

Κεφάλαιο 3°

Εισαγωγή στο σχεδιαστικό πακέτο Gambit

3.1 Εισαγωγή	29
3.2 Επιφάνεια εργασίας γραφικών	30
3.3 Σχεδιασμός του γεωμετρικού μοντέλου του κυλίνδρου	33
3.4 Δημιουργία υπολογιστικού πλέγματος στο γεωμετρικό μοντέλο	35
3.4.1 Δημιουργία υπολογιστικού πλέγματος σε επιφάνειες	35
3.4.2 Δημιουργία υπολογιστικού πλέγματος σε όγκο	39
3.5 Προσδιορισμός ζωνών και ορίων στο γεωμετρικό μοντέλο	43

Κεφάλαιο 4^ο

Εισαγωγή στο υπολογιστικό πακέτο Fluent

4.1 Εισαγωγή	44
4.2 Διαδικασία αντιμετώπισης και επίλυσης προβλημάτων στο Fluent	46
4.3 Επιφάνεια εργασίας Fluent	48
4.3.1 Εντολές για την εισαγωγή και αποθήκευση αρχείων στο Fluent (<i>File...</i>)	48
4.3.2 Εντολές που αφορούν το υπολογιστικό πλέγμα (<i>Grid...</i>)	49
4.3.3 Εντολές που αφορούν τον προσδιορισμό της αριθμητικής μεθόδου επίλυσης του προβλήματος, οριακών συνθηκών και φυσικοχημικών ιδιοτήτων του υλικού (<i>Define ...</i>)	51
4.3.3.1 Εντολές που αφορούν τον προσδιορισμό της αριθμητικής μεθόδου επίλυσης του προβλήματος	51
4.3.3.2 Εντολές που αφορούν τον προσδιορισμό φυσικοχημικών ιδιοτήτων του υλικού (<i>p.c.m.</i>)	52
4.3.3.3 Εντολές που αφορούν τον προσδιορισμό οριακών συνθηκών στη γεωμετρία	53
4.3.4 Εντολές που αφορούν την εφαρμογή της αριθμητικής επίλυσης του προβλήματος (<i>Solve...</i>)	54
4.3.4.1 Εντολές που αφορούν την επαναληπτική διαδικασία που θα ακολουθηθεί για την εφαρμογή της αριθμητικής μεθόδου	54
4.3.4.2 Εντολές που αφορούν την έναρξη της επαναληπτικής διαδικασίας με αρχικές τιμές	56
4.3.4.3 Εντολές που αφορούν κριτήρια σύγκλισης για την προσέγγιση της αριθμητικής λύσης και σταθμικά υπόλοιπα	56
4.3.4.4 Εντολές που αφορούν τον αριθμό των επαναλήψεων ανά χρονικό βήμα	58
4.3.5 Εντολές που αφορούν την απεικόνιση των αποτελεσμάτων σε περιβάλλον με γραφικά και σε γραφικές παραστάσεις (<i>Plot...</i>)	59

Κεφάλαιο 5^ο

Προσομοίωση και υπολογισμοί στο Fluent

5.1 Εισαγωγή – Παραδοχές	60
5.2 Υπολογιστικά σενάρια με βάση τη Σταθερά Ζώνης Τήξης, A_{Mush}	62
5.2.1 Εισαγωγή – Ορισμός σταθερών τιμών παραμέτρων	62
5.2.2 Υπολογιστικό σενάριο <u>2.1</u>	63
5.2.3 Υπολογιστικό σενάριο <u>2.2</u>	64
5.2.4 Υπολογιστικό σενάριο <u>2.3</u>	65
5.2.5 Υπολογιστικό σενάριο <u>2.4</u>	66
5.2.6 Σχολιασμός αποτελεσμάτων	67
5.3 Υπολογιστικά σενάρια με βάση τους συντελεστές υποχαλάρωσης	68
5.3.1 Εισαγωγή – Ορισμός σταθερών τιμών παραμέτρων	68
5.3.2 Υπολογιστικό σενάριο <u>3.1</u>	69
5.3.3 Υπολογιστικό σενάριο <u>3.2</u>	70
5.3.4 Υπολογιστικό σενάριο <u>3.3</u>	71
5.3.5 Υπολογιστικό σενάριο <u>3.4</u>	72
5.3.6 Σχολιασμός αποτελεσμάτων	73

5.4 Υπολογιστικά σενάρια με βάση τη θερμοκρασιακή διαφορά στα άκρα του κυλίνδρου	75
5.4.1 Εισαγωγή – Ορισμός σταθερών τιμών παραμέτρων	75
5.4.2 Υπολογιστικό σενάριο 4.1	76
5.4.3 Υπολογιστικό σενάριο 4.2	77
5.4.4 Υπολογιστικό σενάριο 4.3	78
5.4.5 Υπολογιστικό σενάριο 4.4	79
5.4.6 Σχολιασμός αποτελεσμάτων	80
5.5 Υπολογιστικά σενάρια με βάση την επιλογή χρονικού βήματος για την εξελικτική πορεία του φαινομένου	82
5.5.1 Εισαγωγή – Ορισμός σταθερών τιμών παραμέτρων	82
5.5.2 Υπολογιστικό σενάριο 5.1	83
5.5.3 Υπολογιστικό σενάριο 5.2	84
5.5.4 Υπολογιστικό σενάριο 5.3	85
5.5.5 Υπολογιστικό σενάριο 5.4	86
5.5.6 Σχολιασμός αποτελεσμάτων	87
5.6 Σχόλια - Συμπεράσματα	89

Βιβλιογραφία

Βιβλιογραφία	90
Διαδικτυακοί τόποι	91

Κεφάλαιο 1^ο

Εισαγωγή στα Υλικά Αλλαγής Φάσης (P.C.M.)

1.1 Εισαγωγή

Όλα τα υλικά που είναι γνωστά ανάλογα με τις συνθήκες πίεσης και θερμοκρασίας που επικρατούν μπορούν να βρίσκονται σε μία από τις τρεις φάσεις στερεή, υγρή ή αέρια. Αν χρησιμοποιηθεί ως κριτήριο ταξινόμησης ο μηχανισμός αποθήκευσης ενέργειας μέσα στο υλικό (χαρακτηρίζει σε μεγάλο βαθμό τη γενικότερη θερμική συμπεριφορά του υλικού) τότε θα μπορούσαν να δημιουργηθούν δύο κατηγορίες :

- Τα υλικά που αποθηκεύουν θερμότητα σε μορφή αισθητής θερμότητας σε ολόκληρο το θερμοκρασιακό εύρος χρήσης τους
- Τα υλικά που αποθηκεύουν θερμότητα σε μορφή λανθάνουσας θερμότητας σε ένα τμήμα του θερμοκρασιακού εύρους χρήσης τους ενώ στο υπόλοιπο τμήμα συναλλάσσουν θερμότητα με τη μορφή αισθητής θερμότητας.

Για την πρώτη κατηγορία χαρακτηριστικό μέγεθος για τη θερμική συμπεριφορά τους αποτελεί η ειδική θερμοχωρητικότητα υπό σταθερή πίεση ή όγκο, ενώ για τη δεύτερη κατηγορία χαρακτηριστικό μέγεθος αποτελεί η λανθάνουσα θερμότητα που απαιτείται για την αλλαγή φάσης.

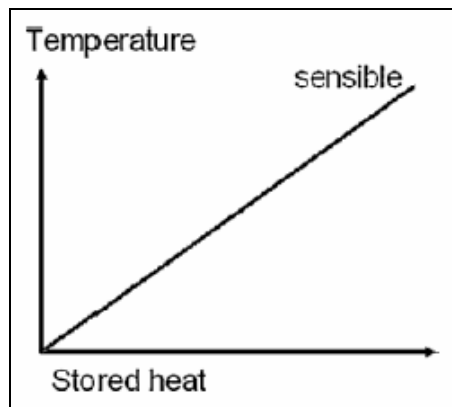
Τα υλικά που αλλάζουν φάση στο εύρος των θερμοκρασιών της εφαρμογής που χρησιμοποιούνται ονομάζονται Υλικά Αλλαγής Φάσης (*P.C.M. s*, δηλ. *Phase Change Materials*). Τα P.C.M. είναι υλικά αποθήκευσης λανθάνουσας θερμότητας, χρησιμοποιώντας χημικούς δεσμούς για αποθηκεύσουν και να απελευθερώσουν θερμότητα. Η αποθήκευση ή η απελευθέρωση της θερμότητας πραγματοποιείται όταν το υλικό μεταπίπτει από στερεό σε υγρό και αντίστροφα.

1.2 Βασικές Αρχές Θερμοδυναμικής

1.2.1 Αποθήκευση θερμότητας ως Αισθητή Θερμότητα

Ο τρόπος αποθήκευσης ζέστης ή κρύου είναι δυνατόν να πραγματοποιηθεί χρησιμοποιώντας διάφορες φυσικές ή χημικές διαδικασίες, οι οποίες παρουσιάζουν πλεονεκτήματα και μειονεκτήματα.

Ο πιο διαδεδομένος τρόπος αποθήκευσης θερμότητας είναι υπό τη μορφή της αισθητής θερμότητας. Στο σχ. 1.1 που ακολουθεί, φαίνεται ότι καθώς αποθηκεύεται θερμότητα υπό τη μορφή αισθητής θερμότητας, παρατηρείται αύξηση της θερμοκρασίας όταν υφίσταται αποθήκευση θερμότητας.



Σχήμα 1.1. Αποθήκευση θερμότητας ως Αισθητή θερμότητα συναρτήσει της θερμοκρασίας.

Η αύξηση θερμοκρασίας μπορεί να ανιχνευθεί από έναν αισθητήρα, η θερμότητα που αποθηκεύεται ονομάζεται αισθητή θερμότητα. Η αποθήκευση θερμότητας υπό μορφή αισθητής θερμότητας γίνεται κατά κύριο λόγο σε στερεά δομικά στοιχεία, όπως τούβλο, πέτρα κλπ καθώς επίσης και σε υγρά, όπως το νερό. Τα αέρια λόγω της χαμηλής θερμοχωρητικότητάς τους δεν χρησιμοποιούνται για αποθήκευση αισθητής θερμότητας.

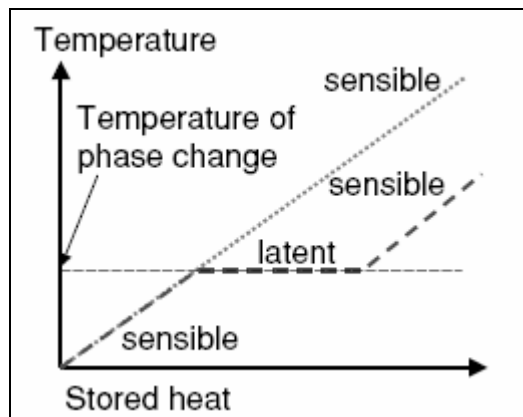
1.2.2 Αποθήκευση θερμότητας ως Λανθάνουσα Θερμότητα

Αν η θερμότητα αποθηκεύεται ως λανθάνουσα θερμότητα, τότε έχουμε μια αλλαγής φάσης του υλικού στο οποίο αποθηκεύεται η θερμότητα. Επομένως διακρίνουμε τις ακόλουθες περιπτώσεις:

- Εξάτμιση του υλικού που αποθηκεύεται η θερμότητα . Η εξάτμιση είναι μια αλλαγή φάσης με μεγάλη μεταβολή του ενθαλπικού περιεχομένου του υπό εξάτμιση υλικού, ωστόσο η διαδικασία της εξάτμισης είναι αναγκαίο να γίνεται σε καθορισμένες συνθήκες, οι οποίες είναι :
 - ▶ Σταθερός όγκος : η εξάτμιση συνοδεύεται από αύξηση της θερμοκρασίας και της πίεσης στον όγκο που εξατμίζεται, κάτι που τεχνικά δεν είναι δυνατό να επιτευχθεί.
 - ▶ Σταθερή πίεση σε κλειστά Θ/Δ συστήματα : που προκαλεί αύξηση του όγκου, γεγονός που επίσης δεν είναι τεχνολογικά επιτεύξιμο.

- *Σταθερή πίεση σε ανοιχτά Θ/Δ συστήματα* : καθώς το υλικό φορτίζεται θερμικά προκειμένου να εξατμιστεί, εξατμίζεται και διαφεύγει στο περιβάλλον. Ο μόνος τρόπος για να αποφορτιστεί το υλικό είναι να επανασυλλεγεί από το περιβάλλον. Το μόνο υλικό που είναι δυνατόν να συλλεγεί από το περιβάλλον είναι το νερό.
- *Αλλαγές φάσης μεταξύ στερεού και υγρού (τήξη)* . Η τήξη είναι επίσης μια αλλαγή φάσης με μεγάλη μεταβολή του ενθαλπικού περιεχομένου του υπό τήξη υλικού. Η τήξη χαρακτηρίζεται από μικρή αλλαγή του όγκου του υλικού, που συνήθως υπολογίζεται στο 10 % του αρχικού όγκου. Αν το υλικό το οποίο τήκεται τοποθετηθεί σε ένα χώρο, τότε λόγω της τήξης η αλλαγή της πίεσης του υγρού δεν αλλάζει σημαντικά. Έτσι η στερεοποίηση και η τήξη γίνονται υπό σταθερή θερμοκρασία. Οι αλλαγές φάσεων μεταξύ υγρού και στερεού έχουν πολλές τεχνικές εφαρμογές.
- *Αλλαγές φάσης μεταξύ στερεού και στερεού* . Οι αλλαγές φάσης στερεού – στερεού παρουσιάζουν ομοιότητες σε σχέση με αυτές των στερεών και υγρών, αλλά συνήθως δεν συνοδεύονται από αλλαγές της ενθαλπίας του υλικού.

Στο σχ. 1.2 που ακολουθεί, φαίνεται η αποθήκευση θερμότητας ως λανθάνουσα θερμότητα για την περίπτωση αλλαγής φάσης μεταξύ στερεού – υγρού.



Σχήμα 1.2. Αποθήκευση θερμότητας ως λανθάνουσα θερμότητα συναρτήσει της θερμοκρασίας

Κατά τη διάρκεια της τήξης, θερμότητα μεταφέρεται στο υλικό και η θερμοκρασία διατηρείται σταθερή στη θερμοκρασία τήξης. Αν η ενθαλπία τήξης έχει μεταφερθεί στο υλικό, τότε η τήξη έχει ολοκληρωθεί και περαιτέρω πρόσδοση θερμότητας εκλαμβάνεται πλέον σαν ποσό αισθητής θερμότητας. Το ποσό της θερμότητας που απορροφάται κατά την τήξη δεν είναι δυνατόν να ανιχνευθεί μέσω της θερμοκρασίας και η θερμότητα που αποθηκεύεται λέγεται λανθάνουσα θερμότητα. Τα υλικά τα οποία αλλάζουν φάση στερεού – υγρού και χρησιμοποιούνται για την αποθήκευση ζέστης ή κρύου, λέγονται Υλικά αποθήκευσης λανθάνουσας θερμότητας ή P.C.M..

1.3 Φυσικές, Τεχνικές και Οικονομικές ιδιότητες για τα P.C.M.

Η κατάλληλη θερμοκρασία αλλαγής φάσης και η μεγάλη ενθαλπία τήξης είναι οι βασικές απαιτήσεις που πρέπει να καλυφθούν από ένα P.C.M. . Εντούτοις, υπάρχουν απαιτήσεις που πρέπει να καλυφθούν για τις περισσότερες, αλλά όχι όλες τις εφαρμογές. Οι βασικότερες από αυτές είναι οι ακόλουθες :

Φυσικές ιδιότητες :

1. Κατάλληλη θερμοκρασία αλλαγής φάσης, ώστε να εξασφαλισθεί η αποθήκευση και στη συνέχεια η απελευθέρωση της θερμότητας σε μια εφαρμογή, με σταθερό θερμοκρασιακό εύρος.
2. Μεγάλο ποσό ενθαλπίας αλλαγής φάσης (ΔH), για να επιτευχθεί υψηλή πυκνότητα αποθήκευσης θερμότητας σε σχέση με την αποθήκευση που θα γινόταν αν είχαμε αποθήκευση ενέργειας με αισθητή θερμότητα.
3. Μεγάλη τιμή της θερμικής αγωγιμότητας, ώστε να είναι δυνατή η εξαγωγή της αποθηκευμένης θέρμανσης ή ψύξης με ικανοποιητικό ποσό θερμοροής.
4. Δυνατότητα αναστρεψιμότητας των αλλαγών φάσεων, ώστε το υλικό να είναι δυνατόν να χρησιμοποιηθεί πολλές φορές. Οι σταθερότητα των κύκλων φόρτισης του υλικού στη διεθνή βιβλιογραφία καλούνται « *cycling stability* ».
5. Μικρό ποσό υπόψυξης (*subcooling*), ώστε να βεβαιωθούμε ότι το υλικό τήκεται και στερεοποιείται στις ίδιες θερμοκρασίες.

Τεχνικές ιδιότητες :

1. Μικρή τιμή της πίεσης ατμών, για να μειωθούν απαιτήσεις μηχανικής αντοχής στο δοχείο που θα βρίσκεται το υλικό αλλαγής φάσης.
2. Μικρή μεταβολή του όγκου κατά την αλλαγή φάσης, επίσης για να μειωθούν οι απαιτήσεις μηχανικής αντοχής στο δοχείο που θα φέρει το εν λόγω υλικό.
3. Φυσική και χημική σταθερότητα του υλικού για να έχει μεγάλη διάρκεια ζωής.
4. Συμβατότητα με άλλα υλικά, ώστε να εξασφαλίζεται η μακροχρόνια διάρκεια ζωής του στο δοχείο, χωρίς να επηρεάζεται η δομή και η σύστασή του από τα υλικά των τοιχωμάτων του δοχείου.

Οικονομικές ιδιότητες :

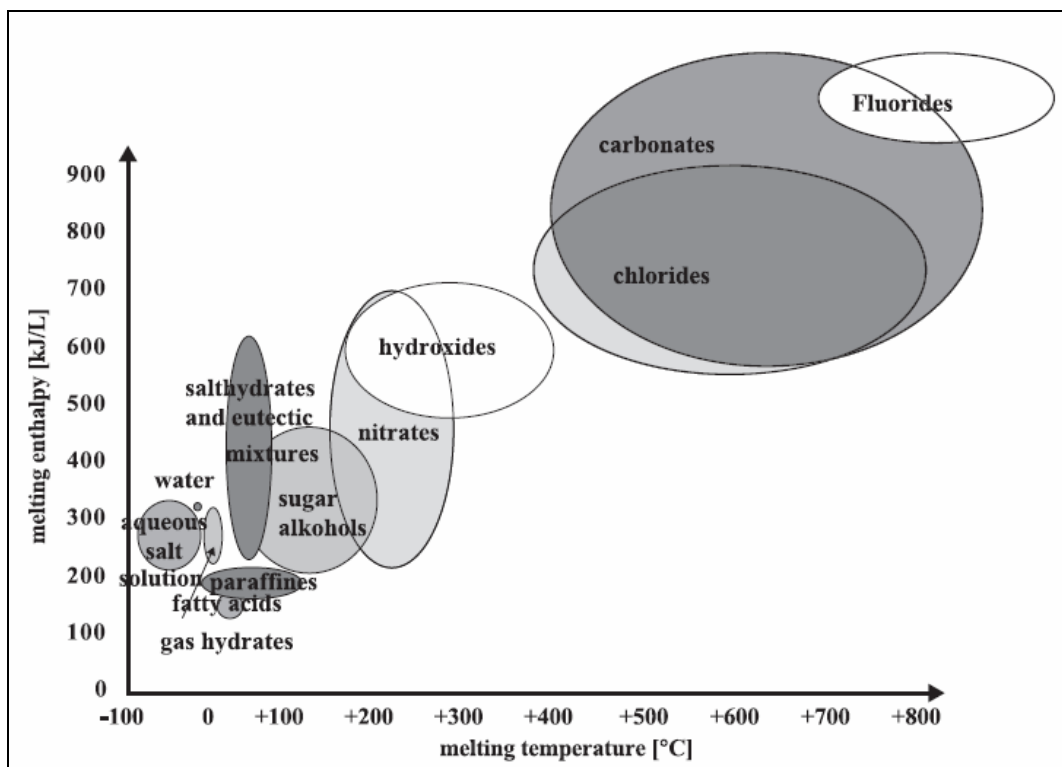
1. Χαμηλή τιμή πώλησης, ώστε να είναι ανταγωνιστικό σε σχέση με άλλα προϊόντα τα οποία προσφέρουν αποθήκευση θερμότητας για θέρμανση και ψύξη.
2. Μη τοξικά, για περιβαλλοντικούς λόγους και λόγους ασφάλειας .
3. Ανακυκλώσιμα, επίσης για περιβαλλοντικούς και οικονομικούς λόγους.

Συνήθως η επιλογή της χρήσης ενός υλικού αλλαγής φάσης γίνεται με κριτήριο την θερμοκρασία αλλαγής φάσης, την ενθαλπία και την δυνατότητα αναστρεψιμότητα του κύκλου ψύξης – τήξης. Όμως στην πλειονότητα των περιπτώσεων ένα υλικό δεν είναι δυνατόν να καλύψει όλες τις παραπάνω απαιτήσεις, διότι για παράδειγμα όταν η θερμική αγωγιμότητα είναι μικρή, τότε απαιτείται η τοποθέτηση του υλικού σε κάψουλες (*encapsulation*), ώστε να διευκολυνθεί η μετάδοση της αποθηκευμένης θερμότητας. Επομένως έχουν αναπτυχθεί στρατηγικές και προσεγγίσεις οι οποίες έχουν στόχο να αντιμετωπίσουν αυτά τα προβλήματα.

1.4 Κατηγοριοποίηση των P.C.M.

1.4.1 Εισαγωγή

Το πιο γνωστό P.C.M. είναι το νερό. Εμφανίζεται στη φύση και έχει χρησιμοποιηθεί για την αποθήκευση ψύξης από τις αρχές του 18^{ου} αιώνα. Ακόμα και σήμερα η αποθήκευση ψύξης με νερό χρησιμοποιείται και ακόμα ψύξη με πάγο και χιόνι βρίσκει εφαρμογές. Ωστόσο για εφαρμογές όπου το σημείο τήξης είναι μικρότερες του σημείου πήξης του νερού 0 °C, έχουν χρησιμοποιηθεί άλλα υλικά. Στο σχ. 1.3 που ακολουθεί, παρουσιάζεται το τυπικό εύρος της ενθαλπίας τήξης πάνω από τη θερμοκρασία τήξης, για διάφορα υλικά.



Σχήμα 1.3. Τύποι υλικών που μπορούν να χρησιμοποιηθούν σαν P.C.M. , ανάλογα με την ενθαλπία και θερμοκρασία τήξης τους

1.4.2 Ανόργανα υλικά

Τα ένυδρα άλατα είναι ο κύριος εκπρόσωπος των ανόργανων αλάτων παρουσιάζουν αρκετά καλές ιδιότητες (τιμή λανθάνουσας θερμότητας ~ 250 KJ/kg και θερμικής αγωγιμότητας ~ 0.6 W/mK), μέτριο κόστος παραγωγής σε σχέση με τις παραφίνες αλλά υψηλό κόστος πώλησης λόγω της επιβεβλημένης ενσωμάτωσής τους σε προστατευτικό κάλυμμα και χρήση πρόσθετων ουσιών σταθεροποίησης των ιδιοτήτων τους.

Συμπερασματικά τα κυριότερα προβλήματα που παρουσιάζει η χρήση των ένυδρων αλάτων δημιουργούνται λόγω της ανεπάρκειας σταθερότητας της χημικής σύνθεσης του υλικού και του φαινόμενου διάβρωσης μεταξύ του υλικού και του υλικού συσκευασίας. Το πλεονέκτημα των ένυδρων αλάτων έναντι των παραφινών,

ιδιαίτερος για κτιριακή χρήση και ενσωμάτωση σε δομικά υλικά είναι η μη αναφλεξιμότητά τους.

Στο πλαίσιο αναφοράς των ιδιοτήτων δεν θα πρέπει να παραλειφθεί ο ρόλος της πυκνότητας των υλικών (τιμή πυκνότητας $\sim 1 \text{ gr/cm}^3 = 1000 \text{ kg/m}^3$), σημαντικός παράγοντας όταν αυτά χρησιμοποιούνται σε εγκαταστάσεις που από τη φύση τους απαιτούν οικονομία χώρου. Τα ένυδρα άλατα είναι γενικότερα πυκνότερα υλικά από τις άλλες κατηγορίες των P.C.M. για αυτό και παρουσιάζουν ιδιαίτερα αυξημένες τιμές αποθήκευσης ενέργειας ανά μονάδα όγκου.

Στο σχ. 1.3 που παρατέθηκε παραπάνω φαίνεται ότι τα ανόργανα υλικά καλύπτουν ένα ευρύ θερμοκρασιακό φάσμα. Περιλαμβάνουν το νερό στους 0°C , ιζηματώδη υδατογενή άλατα με θερμοκρασίες κάτω των 0°C , ένυδρα άλατα με θερμοκρασίες μεταξύ $5^\circ\text{C} - 130^\circ\text{C}$. Στον ακόλουθο πίνακα, Πιν. 1.1, παρουσιάζονται ανόργανα υλικά τα οποία έχουν χρησιμοποιηθεί σαν βάση για την κατασκευή P.C.M..

Material	Melting temperature ($^\circ\text{C}$)	Heat of fusion (kJ/kg)	Thermal conductivity (W/m K)	Density (kg/m^3)
H_2O	0	333	0.612 (liquid, 20°C)	998 (liquid, 20°C) 917 (solid, 0°C)
$\text{LiClO}_3 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$	8	253	Not available	1,720
$\text{CaCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$	29 30	171, 192	0.540 (liquid, 39°C) 1.088 (solid, 23°C)	1,562 (liquid, 32°C), 1,496 (liquid), 1,802 (solid, 24°C) 1,710 (solid, 25°C)
$\text{LiNO}_3 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$	30	296	Not available	Not available
$\text{Na}_2\text{HPO}_4 \cdot 12\text{H}_2\text{O}$	35–44	265	0.476 (liquid) 280 (solid)	1,522
$\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$	48–55	187, 209	Not available	1,670 (liquid) 1,750 (solid)
$\text{Na}(\text{CH}_3\text{COO}) \cdot 3\text{H}_2\text{O}$	58	226, 264	Not available	1,280 (liquid) 1,450 (solid)
$\text{Ba}(\text{OH})_2 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$	78	265, 280	0.653 (liquid, 86°C) 1.255 (solid, 23°C)	1,937 (liquid, 84°C) 2,180 (solid)
$\text{Mg}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6 \text{H}_2\text{O}$	89	149, 163	0.490 (liquid, 95°C) 0.669 (solid, 55.6°C)	1,550 (liquid, 94°C) 1,636 (solid, 25°C)
$\text{MgCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$	117	165, 169	0.570 (liquid, 120°C) 0.704 (solid, 110°C)	1,450 (liquid, 120°C) 1,569 (solid, 20°C)
NaNO_3	307	172	0.5	2,260
KNO_3	333	266	0.5	2,110
KOH	380	145	0.5	2,044
MgCl_2	714	452	Not available	2,140
NaCl	800	492	5	2,160
Na_2CO_3	854	276	2	2,533
KF	857	452	not available	2,370
K_2CO_3	897	236	2	2,290

Πίνακας 1.1 Θερμοκρασία τήξης, Ροή θερμότητας, Θερμική αγωγιμότητα και Πυκνότητα ανόργανων υλικών που έχουν χρησιμοποιηθεί ως P.C.M.

1.4.3 Οργανικά υλικά

Τα οργανικά υλικά εκπροσωπούνται κυρίως από τις παραφίνες. Τα εμπορικά προϊόντα των παραφινών είναι αρκετά φτηνότερα από τα ένυδρα άλατα με τιμές λανθάνουσας θερμότητας ~ 150 KJ/kg, είναι χημικά αδρανή και σταθερά χωρίς να παρουσιάζουν διαχωρισμό φάσεων και εκφυλισμό των ιδιοτήτων τους. Δυστυχώς όμως παρουσιάζουν μικρή τιμή του συντελεστή αγωγιμότητας ~ 0.2 W/m $^{\circ}$ C, ιδιότητα που περιορίζει τις εφαρμογές τους. Για αυτό το λόγο έχουν εξεταστεί πολλές περιπτώσεις εμπλουτισμού του υλικού με μεταλλικά αντικείμενα διαφόρων σχημάτων ή χρήση δοχείων και σωλήνων με πτερύγια με σκοπό την αύξηση του ρεύματος θερμότητας μέσα στο υλικό.

Οι παραφίνες παρουσιάζουν άριστη συμπεριφορά στην κυκλική καταπόνηση χωρίς καμιά υποβάθμιση των ιδιοτήτων τους. Επιπλέον δεν παρουσιάζουν προβλήματα διάβρωσης με κανένα ευρέως χρησιμοποιούμενο μέταλλο.

Στο σχ. 1.3 που παρατέθηκε παραπάνω φαίνεται ότι τα οργανικά άλατα καλύπτουν μικρότερο θερμοκρασιακό φάσμα σε σχέση με αυτό των ανόργανων υλικών, με θερμοκρασίες που κυμαίνονται από 0 $^{\circ}$ C - 140 $^{\circ}$ C. Περιλαμβάνουν παραφίνες, λιπαρά οξέα και αλκοολούχα σάκχαρα. Στις περισσότερες περιπτώσεις η πυκνότητά τους είναι μικρότερη από 1 gr/cm 3 , και όπως παρατηρούμε οι παραφίνες και τα λιπαρά οξέα παρουσιάζουν μικρότερες τιμές ενθαλπίας τήξης έναντι των ανόργανων υλικών. Στους ακόλουθους πίνακες Πιν. 1.2 & Πιν. 1.3, παρουσιάζονται παραφίνες και αλκοολούχα σάκχαρα (Πιν. 1.2), και λιπαρά οξέα (Πιν. 1.3) τα οποία έχουν χρησιμοποιηθεί σαν βάση για την κατασκευή P.C.M..

Material	Melting temperature ($^{\circ}$ C)	Heat of fusion (kJ/kg)	Thermal conductivity (W/m K)	Density kg/m 3)
Paraffin C14	4	165	Not available	Not available
Paraffin C15–C16	8	153	Not available	Not available
Paraffin C16–C18	20–22	152	Not available	Not available
Paraffin C18	28	244	0.148 (liquid, 40 $^{\circ}$ C), 0.358 (solid, 25 $^{\circ}$ C)	774 (liquid, 70 $^{\circ}$ C) 814 (solid, 20 $^{\circ}$ C)
Erythritol	118	340	0.326 (liquid, 140 $^{\circ}$ C), 0.733 (solid, 20 $^{\circ}$ C)	1,300 (liquid, 140 $^{\circ}$ C), 1,480 (solid, 20 $^{\circ}$ C)
High density polyethylene (HDPE)	100–150	200	Not available	Not available

Πίνακας 1.2. Θερμοκρασία τήξης, Ροή θερμότητας, Θερμική αγωγιμότητα και Πυκνότητα παραφινών και Αλκοολούχων Σακχάρων που έχουν χρησιμοποιηθεί ως P.C.M.

Material	Melting temperature (°C)	Heat of fusion (kJ/kg)	Thermal conductivity (W/m K)	Density (kg/m ³)
Caprylic acid	16	149	0.149 (liquid, 38 °C)	901 (liquid, 30 °C) 981 (solid, 13 °C)
Butyl stearate	19	140 123–200	Not available	Not available
Capric acid	32	153	0.153 (liquid, 38 °C), 0.149 (liquid, 40 °C)	886 (liquid, 40 °C), 1,004 (solid, 24 °C)
Lauric acid	42–44	178	0.147 (liquid, 50 °C)	870 (liquid, 50 °C), 1,007 (solid, 24 °C)
Myristic acid	49–58	186, 204	Not available	861 (liquid, 55 °C), 990 (solid, 24 °C)
Palmitic acid	61, 64	185, 203	0.162 (liquid, 68 °C), 0.159 (liquid, 80 °C),	850 (liquid, 65 °C) 989 (solid, 24 °C)

Πίνακας 1.3. Θερμοκρασία τήξης, Ροή θερμότητας, Θερμική αγωγιμότητα και Πυκνότητα λιπαρών Οξέων που έχουν χρησιμοποιηθεί ως P.C.M.

1.4.4 Μίξη Ανόργανων και Οργανικών υλικών

Τα τελευταία χρόνια έχουν γίνει προσπάθειες μίξης οργανικών και ανόργανων υλικών, ωστόσο δεν έχουν αναφερθεί πολλές διαφοροποιήσεις. Ορισμένα από αυτά τα αποτελέσματα φαίνονται στον Πιν. 1.4.

Material	Melting temperature (°C)	Heat of fusion (kJ/kg)	Thermal conductivity (W/m K)	Density (kg/m ³)
48% CaCl ₂ + 4.3% NaCl + 0.4% KCl + 47.3% H ₂ O	27	188	Not available	1,640
58.7% Mg(NO ₃) · 6H ₂ O + 41.3% MgCl ₂ · 6H ₂ O	58, 59	132	0.510 (liquid, 65 °C) 0.678 (solid, 53 °C)	1,550 (liquid, 50 °C) 1,630 (solid, 24 °C)
66.9% NaF + 33.1% MgF ₂	832	Not available	Not available	2,190 (liquid), 2,940 (solid, 25 °C)

Πίνακας 1.4. Θερμοκρασία τήξης, Ροή θερμότητας, Θερμική αγωγιμότητα και Πυκνότητα. Μίξη ανόργανων και οργανικών υλικών, που έχουν χρησιμοποιηθεί ως P.C.M.

1.5 Προσεγγίσεις για την επίλυση προβλημάτων που αφορούν τα υλικά των P.C.M.

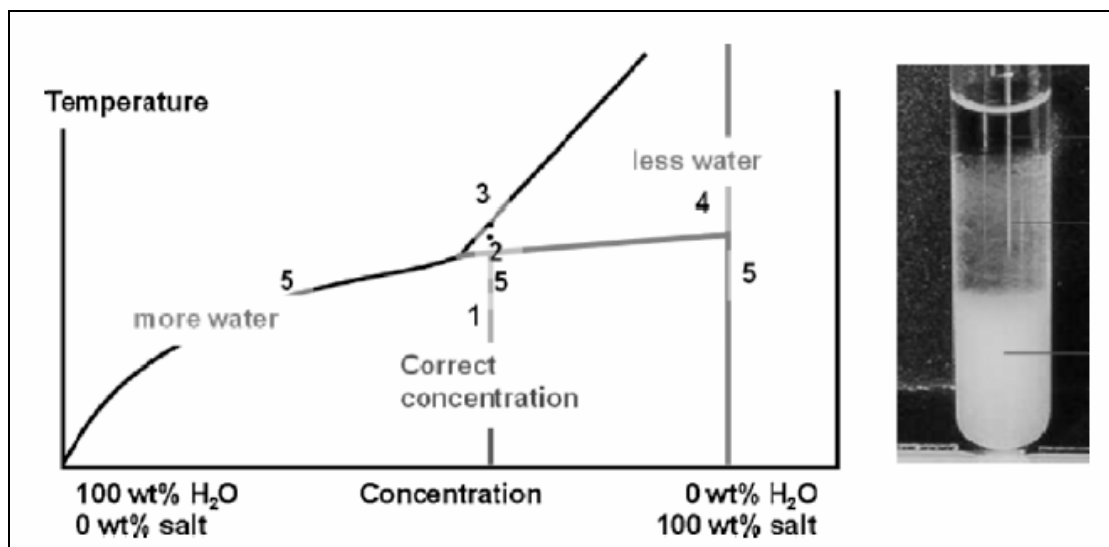
1.5.1 Εισαγωγή

Συνήθως, κατά την επιλογή ενός υλικού, για να χρησιμοποιηθεί ως Υλικό Αλλαγής Φάσης, δεν πληρούνται όλες οι προϋποθέσεις για την ενδεχόμενη χρήση του. Για αυτό το λόγο έχουν αναπτυχθεί διάφορες στρατηγικές προκειμένου να επιλυθούν τέτοιου είδους προβλήματα. Παρακάτω παρουσιάζονται ορισμένα από τα βασικότερα προβλήματα που εμφανίζονται σε αυτού του είδους τα υλικά.

1.5.2 Διαχωρισμός φάσεων

Το φαινόμενο του διαχωρισμού φάσης, στη διεθνή βιβλιογραφία καλείται « *phase separation* » ή « *semi congruent melting* ». Είναι ένα από τα βασικότερα προβλήματα που εμφανίζονται στα P.C.M., ιδιαίτερα μάλιστα σε αυτά που αποτελούνται από παραπάνω από δύο συστατικά. Το φαινόμενο του διαχωρισμού φάσης οφείλεται στην μεγάλη θερμοαποθηκευτική ικανότητα των ένυδρων αλάτων που είναι δύσκολο να διατηρηθεί καθώς μειώνεται με τους κύκλους φόρτισης του υλικού. Κύρια αιτία εκφυλισμού των θερμικών ιδιοτήτων των υλικών είναι ο διαχωρισμός των φάσεων του υλικού και ο πιθανός σχηματισμός άνυδρων αλάτων με δημιουργία ιζήματος. Το φαινόμενο λαμβάνει χώρα λόγω του ότι τα ένυδρα άλατα τήκονται σύμφωνα με το κατώτερο συστατικό του μίγματος, δημιουργώντας μη αναστρέψιμη διαδικασία που οδηγεί σε συνεχή εξασθένηση των ιδιοτήτων τους.

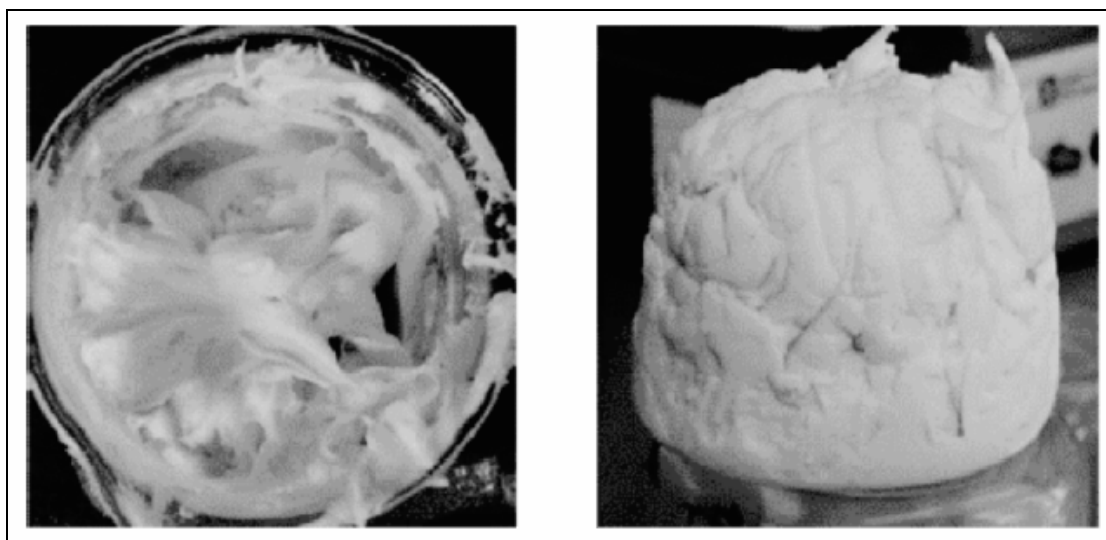
Ο ακριβής μηχανισμός του φαινομένου περιγράφεται παρακάτω με ένα παράδειγμα. Έστω ότι έχουμε ένα ένυδρο άλας αποτελούμενο από δύο συστατικά ($\text{CaCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$). Το διάγραμμα ισορροπίας φάσεων του ένυδρου άλατος φαίνεται στο σχ. 1.4.



Σχήμα 1.4. Διάγραμμα ισορροπίας φάσεων άλατος-νερού, αντιστοιχία των φάσεων με δοκιμαστικό σωλήνα, για δεδομένη σύσταση και συγκεκριμένες θερμοκρασίες

Το μονοφασικό μίγμα κατάστασης 1 (στερεό) θερμαίνεται μέχρι τη θερμοκρασία στο σημείο 2. Από το σημείο 3 και πάνω, έχουμε τμήσει την *liquidus* οπότε οτιδήποτε βρίσκεται πάνω από αυτή την ευθεία είναι σε υγρή κατάσταση. Κατά τη θέρμανση ή ψύξη μεταξύ των σημείων 2 και 3, σχηματίζονται δύο φάσεις, μία υγρή και μια άλλη φάση με κάποιο μικρό ποσοστό νερού (σημείο 4). Αν αυτές οι δύο φάσεις διαφέρουν σε πυκνότητα, τότε υπάρχει περίπτωση να έχουμε μακροσκοπικό διαχωρισμό των φάσεων και συνεπώς οι δύο φάσεις θα έχουν διαφορετικές συγκεντρώσεις στη δομή του P.C.M. (σημείο 5).

Για την αποφυγή τέτοιων φαινομένων διαχωρισμού φάσεων χρησιμοποιούνται κολλοειδή προσθετικά (*gelling additives*), τα οποία δημιουργούν μια δομή γύρω από τις φάσεις των συστατικών του υλικού και δεν επιτρέπουν τη διέλευση φάσεων με διαφορετικές πυκνότητες διαμέσου της δομής τους. Στο σχ. 1.5 φαίνεται η χρήση κολλοειδών προσθετικών σε ένυδρο άλας χλωριούχου ασβεστίου. Εναλλακτικά αν δεν χρησιμοποιηθούν προσθετικά, είναι δυνατόν να αναθερμάνουμε το μίγμα και με μοριακή διάχυση να επανέλθει στην αρχική του κατάσταση.



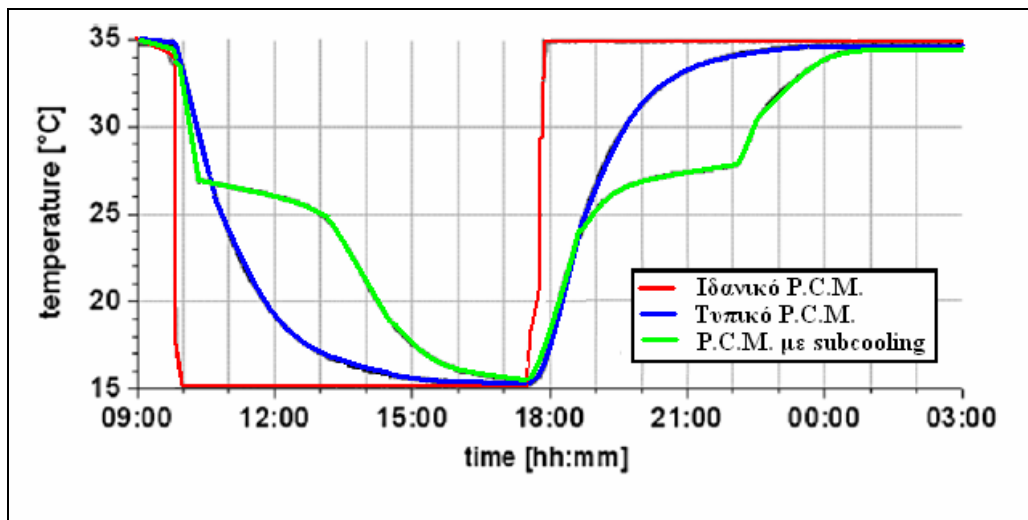
Σχήμα 1.5. Χρήση κολλοειδούς προσθετικού σε ένυδρο άλας $\text{CaCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$

1.5.3 Το φαινόμενο της Υπόψυξης - Υπέρψυξης (*Subcooling – Supercooling*)

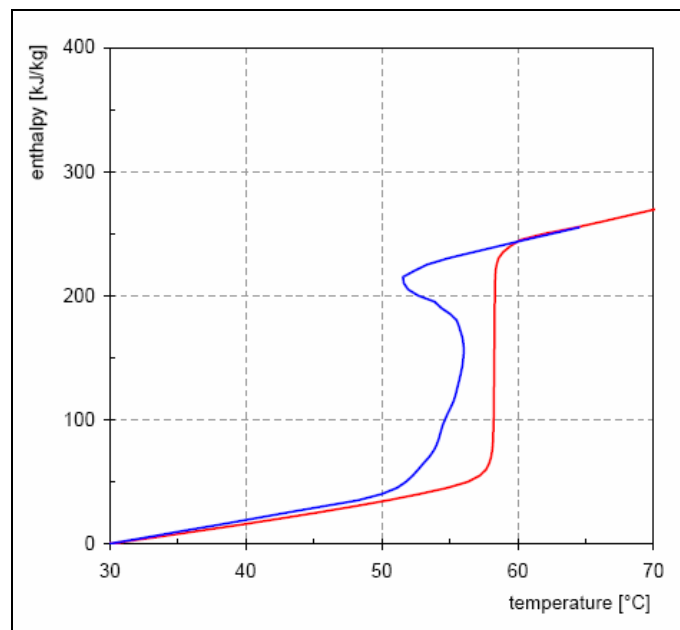
Ένα βασικό πρόβλημα που εμφανίζεται κυρίως στα ανόργανα ένυδρα άλατα είναι το φαινόμενο της υπέρψυξης ή υπόψυξης (*supercooling or subcooling*). Ένα ιδανικό υλικό αλλαγής φάσης θα έπρεπε να στερεοποιείται και να τήκεται στην ίδια θερμοκρασία, όπως φαίνεται στο σχ. 1.6. Κάποια υλικά δεν στερεοποιούνται αμέσως, εάν η θερμοκρασία του υλικού είναι μικρότερη από τη θερμοκρασία τήξης, το φαινόμενο αυτό ονομάζεται υπόψυξη ή υπέρψυξη. Κατά τη διάρκεια της υπόψυξης το υλικό βρίσκεται σε μια μετασταθή κατάσταση. Το φαινόμενο είναι δυνατόν να περιορισθεί με χρήση ενός πυρήνα (*nucleator*), ο οποίος προστίθεται στο P.C.M. για να εξασφαλίσει ότι η στερεή φάση θα σχηματισθεί με μηδαμινή ή ακόμα και καθόλου υπόψυξη.

Τα είδη των πυρήνων που μπορούν να προστεθούν είναι τα ακόλουθα :

- «Εγγενής» Πυρήνες (*Intrinsic nucleators*) : πρόκειται για ίδια συστατικά του P.C.M. , πρέπει να φυλάσσονται ξεχωριστά από το P.C.M., διότι αλλιώς υπάρχει κίνδυνος να τήξουν μαζί με αυτό και κατόπιν να είναι ανενεργά.
- «Συμβατοί» Πυρήνες (*Extrinsic nucleators*) : πρόκειται για χημικά τα οποία παρουσιάζουν όμοια δομή με αυτή των P.C.M., αυτό σημαίνει ότι έχουν παρόμοιες θερμοκρασίες τήξης με το P.C.M. που χρησιμοποιούμε. Επίσης θα πρέπει να φυλάσσονται ξεχωριστά από το P.C.M., διότι αλλιώς υπάρχει κίνδυνος να τήξουν μαζί με αυτό και κατόπιν να είναι ανενεργά



Σχήμα 1.6. Διάγραμμα θερμοκρασίας – χρόνου στερεοποίησης και τήξης ιδανικού και τυπικού P.C.M., φαινόμενο *subcooling*



Σχήμα 1.7. Διάγραμμα ενθαλπίας – θερμοκρασίας τυπικού P.C.M., φαινόμενο *subcooling*

1.5.4 Μικρή τιμή της θερμικής αγωγιμότητας

Η χαμηλή τιμή της θερμικής αγωγιμότητας του P.C.M. είναι μια εγγενής ιδιότητα των μη μεταλλικών υγρών. Το πρόβλημα έγκειται στο ότι το P.C.M., αποθηκεύει ένα μεγάλο ποσό θερμότητας σε μικρό όγκο και αυτή η θερμότητα πρέπει να μεταφερθεί μέσω της επιφάνειας αυτού του όγκου στο εξωτερικό περιβάλλον ώστε να χρησιμοποιηθεί από το σύστημα.

Γενικά υπάρχουν δύο τρόποι βελτίωσης της θερμικής αγωγιμότητας του υλικού, οι οποίοι αναφέρονται παρακάτω :

- Βελτίωση της μεταφοράς θερμότητας που χρησιμοποιώντας μεταφορά μάζας, με μεταφορά. Ο μηχανισμός της μεταφοράς εμφανίζεται μόνο κατά την υγρή φάση και επομένως ενεργεί μόνο όταν θερμότητα μεταφέρεται στο P.C.M.. Όταν η θερμότητα εξάγεται, οι στερεές μορφές σχηματίζονται στις συναλλασσόμενες με θερμότητα επιφάνειες.
- Βελτίωση της μεταφοράς θερμότητας μέσω της αύξησης της θερμικής αγωγιμότητας. Αυτό μπορεί να επιτευχθεί με την προσθήκη των αντικειμένων με μεγαλύτερη θερμική αγωγιμότητα στο P.C.M..

1.5.5 Τοποθέτηση P.C.M. σε Κάψουλες και Σύνθετα Υλικά

Η τοποθέτηση των P.C.M. σε κάψουλες και η χρήση σύνθετων υλικών είναι δύο τεχνολογίες πολλά υποσχόμενες για το μέλλον των P.C.M.. Στις περισσότερες των περιπτώσεων η τοποθέτηση του P.C.M. σε κάψουλες είναι αναγκαία για τεχνικούς λόγους, διότι υπάρχει κίνδυνος να έχουμε διαρροή της υγρής φάσης από το χώρο στον οποίο αυτή χρησιμοποιείται. Στο σχ. 1.8 φαίνονται διάφορα είδη τοποθέτησης P.C.M. σε κάψουλες. Διακρίνουμε δύο είδη ενσωμάτωσης των P.C.M. σε κάψουλες :

- *Macroencapsulation*

Σε αυτή την περίπτωση γίνεται τοποθέτηση του P.C.M. σε κάψουλες με διάμετρο μεγαλύτερη του 1 cm. Εκτός από το ότι αυτή η μέθοδος διατηρεί το υλικό του P.C.M. σε πεπερασμένο χώρο και εμποδίζει την επαφή του με άλλα συστατικά, η μέθοδος παρουσιάζει και τα ακόλουθα προτερήματα :

- ▶ Βελτιώνει τη συμβατότητα του υλικού με το περιβάλλον, καθώς λειτουργεί σαν φράγμα μεταξύ του P.C.M. και του χώρου που αυτό ευρίσκεται.
- ▶ Βελτιώνει τη διακίνηση του P.C.M. κατά την παραγωγή του.
- ▶ Μειώνει ουσιαστικά τις μεταβολές του όγκου, που συνήθως αποτελούν ένα πλεονέκτημα για τις περισσότερες εφαρμογές, ιδίως σε αυτές που οι χωροταξικές προδιαγραφές είναι σε στενά πλαίσια.

- *Microencapsulation*

Σε αυτή την περίπτωση γίνεται τοποθέτηση του P.C.M. σε κάψουλες με διάμετρο μικρότερη του 1 mm. Η μέθοδος έχει τα ίδια χαρακτηριστικά με αυτή της *macroencapsulation* , αλλά έχει επιπλέον τα εξής προτερήματα :




- ▶ Βελτιώνει τη μετάδοση θερμότητας στον περιβάλλοντα χώρο λόγω του μεγάλου ποσοστού της επιφάνειας συναλλαγής.
- ▶ Βελτιώνει ουσιαστικά την σταθερότητα της κυκλικής φόρτισης καθώς ο διαχωρισμός των φάσεων είναι ιδιαίτερα περιορισμένος λόγω των μικροσκοπικών διαστάσεων της κάψουλας που εμπεριέχει το P.C.M..



Σχήμα 1.8. α. *Macroencapsulation* σε παραφίνες,
β. *Microencapsulation* σε παραφίνες,
γ. *Macroencapsulation*, κάψουλα ένυδρου άλατος.

Τα σύνθετα υλικά είναι υλικά που αποτελούνται από ένα P.C.M. και τουλάχιστον ένα άλλο υλικό. Το άλλο υλικό χρησιμοποιείται να βελτιώσει τουλάχιστον μια από τις ιδιότητες του P.C.M.. Η χρήση σύνθετων ενώσεων έχει επιπλέον τα εξής προτερήματα :

- ▶ Βελτιώνει τη σταθερότητα της κυκλικής φόρτισης, αφού οι μικροσκοπικές δομές μειώνουν ουσιαστικά το διαχωρισμό των φάσεων στο τήγμα.
- ▶ Βελτιώνει τη μεταφορά θερμότητας, μέσω της προσθήκης των υλικών με μεγαλύτερη θερμική αγωγιμότητα όπως για παράδειγμα τον γραφίτη.

Encapsulation	Compound materials
<p>Macro encapsulation</p>  <p>⇒ Materials compatibility ⇒ Better handling ⇒ No external volume change</p>	<p>open pores</p>  <p>⇒ Cycling stability ⇒ Larger heat transfer transfer</p> <p>closed Micro encapsulation and micro pores</p>  <p>⇒ Larger heat transfer surface ⇒ Cycling stability</p>

Σχήμα 1.9. Προτερήματα από την ενσωμάτωση P.C.M. σε κάψουλες και τη χρήση σύνθετων υλικών.

1.5.6 Συμβατότητα των P.C.M. με άλλα υλικά

Η συμβατότητα των P.C.M. με άλλα υλικά είναι σημαντική τόσο για τη διάρκεια ζωής του δοχείου ή της κάψουλας που φέρει το P.C.M., όσο και για μία πιθανή διαρροή του τήγματος προς τον περιβάλλοντα χώρο όπου μπορεί να προξενήσει προβλήματα. Τα πιο συνήθη προβλήματα αναφορικά με τη συμβατότητα των υλικών και τα P.C.M. είναι τα ακόλουθα :

- Διάβρωση των μετάλλων όταν έρθουν σε επαφή με ανόργανα P.C.M..
- Απώλεια σταθερότητας δομής των πλαστικών όταν έρχονται σε επαφή με οργανικά P.C.M..
- Μετακίνηση υγρών ή αερίων διαμέσου πλαστικών δοχείων, τα οποία επηρεάζουν τη δομή του περιεχόμενου ανόργανου ή οργανικού P.C.M..

1.5.7 Σταθερότητα θερμικών ιδιοτήτων των P.C.M. σε κυκλική φόρτιση

Το σοβαρότερο κριτήριο για την αξιοποίηση των P.C.M. σε βιομηχανικές εφαρμογές είναι ο ωφέλιμος χρόνος ζωής των υλικών, χωρίς εκφυλισμό των ιδιοτήτων τους, ο οποίος μετριέται καλύτερα σε κύκλους φόρτισης και αποφόρτισης του υλικού παρά σε πραγματικό χρόνο. Η ανεπάρκεια σταθερότητας των υλικών οφείλεται σε δύο λόγους :

- Σε μικρής σταθερότητας χημική σύνθεση του υλικού ή των υλικών που αποτελούν το P.C.M..
- Στο φαινόμενο της διάβρωσης που πιθανόν να λάβει χώρα μεταξύ του P.C.M. και των υλικών που έρχεται σε επαφή.

Το μεγαλύτερο μέρος των ερευνών που ως αντικείμενο αναφοράς έχουν την διατήρηση των ιδιοτήτων των P.C.M. κατά την περιοδική φόρτιση και αποφόρτισή τους ή τη διαβρωτική τους ικανότητα αφορούν τα ένυδρα άλατα. Για τις παραφίνες και τα παράγωγα υλικά τους έχει βρεθεί ότι έχουν άριστη σταθερότητα στις θερμικές τους ιδιότητες καθώς επίσης και καμία επίδραση όταν έρχονται σε επαφή με τα περισσότερα υλικά (μέταλλα αλλά και δομικά υλικά). Αντιθέτως τα ένυδρα άλατα παρουσιάζουν διαβρωτικές τάσεις όταν έρχονται σε άμεση επαφή με τα περισσότερα διαδεδομένα μέταλλα .

Κεφάλαιο 2^ο

Υπολογιστικές Μέθοδοι στα Υλικά Αλλαγής Φάσης

2.1 Εισαγωγή

Οι εφαρμογές των P.C.M. καλύπτουν πολλούς διαφορετικούς τομείς. Το πιο σημαντικό κριτήριο είναι η θερμοκρασία αλλαγής φάσης, T_{ph} . Άμεσα συνδεδεμένη με την τήξη και τη στερεοποίηση είναι η διαδικασία της ροής της θερμότητας. Η ποσότητα της ροής θερμότητας στις διάφορες εφαρμογές καλύπτει ένα ευρύ ενεργειακό πεδίο από μερικά KW, για διαστημικές εφαρμογές θέρμανσης με νερό ή αέρα, δεξαμενές ζεστού νερού και σταθμούς ηλεκτροπαραγωγής, μέχρι μερικά W, για τη διατήρηση σταθερής θερμοκρασίας σε δοχεία.

Οι βασικές απαιτήσεις τις οποίες πρέπει να πληρούν τα P.C.M. είναι οι ακόλουθες :

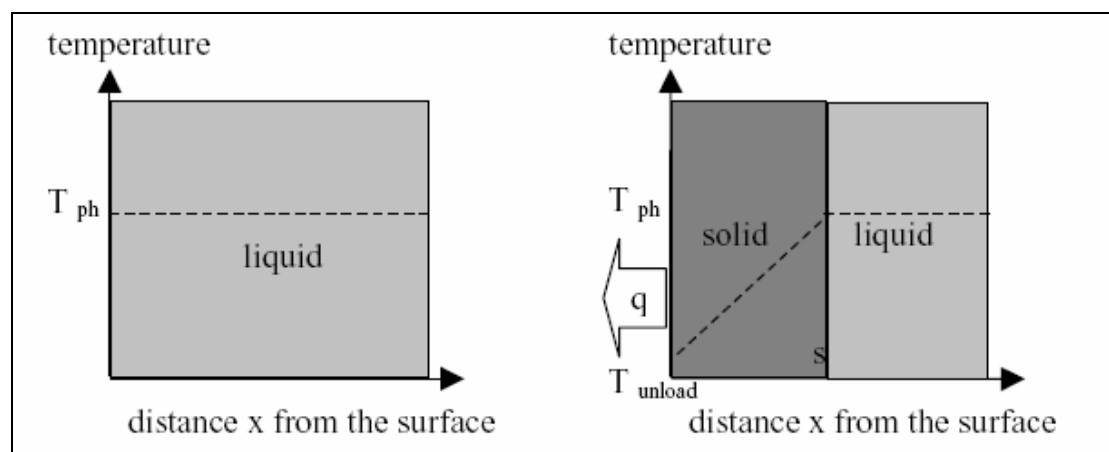
- Από θερμοδυναμική σκοπιά :
 - ▶ Θερμοκρασίες φόρτισης και αποφόρτισης
 - ▶ Ισχύς φόρτισης και αποφόρτισης
 - ▶ Μετάδοση θερμότητας
 - ▶ Πυκνό ενεργειακό περιεχόμενο (KWh or KJ / kg or KJ / m³)

- Από εμπορική άποψη :
 - ▶ Ο όγκος και το βάρος αποθήκευσης
 - ▶ Εύχρηστη κατασκευή
 - ▶ Κόστος

2.2 Αναλυτικά μοντέλα μετάδοσης θερμότητας σε P.C.M.

2.2.1 Αναλυτικό μοντέλο για τη θέρμανση και ψύξη ημιάπειρης επιφάνειας P.C.M. (1 - D)

Ο πιο απλός τρόπος για να εξετάσουμε τη μετάδοση της θερμότητας σε ένα P.C.M. είναι η μελέτη μιας μονοδιάστατης, ημιάπειρης πλάκας P.C.M. η οποία ψύχεται ή θερμαίνεται . Στο σχ. 2.1 φαίνεται το μοντέλο της πλάκας στην περίπτωση της ψύξης, αρχικά το P.C.M. είναι σε υγρή κατάσταση και κατόπιν ψύχεται και στερεοποιείται.



Σχήμα 2.1. Ψύξη ημιάπειρης επιφάνειας P.C.M. α. Αρχική κατάσταση, β. Κατάσταση μετά από χρονικό διάστημα Δt .

Αρχικά προτού ξεκινήσει η ανάλυση αναφέρουμε ορισμένες παραδοχές οι οποίες έγιναν :

- Θεωρούμε ότι η θερμοχωρητικότητα C_p είναι αμελητέα σε σχέση με την ενθαλπία αλλαγής φάσης (δηλ. $C_p \cdot \Delta T \ll \Delta H$), επομένως όλο το ποσό θερμότητας που συναλλάσσεται είναι υπό μορφή λανθάνουσας θερμότητας.
- Δεν υπάρχει αγωγή παρά μόνο μεταφορά θερμότητας
- Τη χρονική στιγμή $t = 0$, το P.C.M. είναι τελείως σε υγρή κατάσταση και έχει θερμοκρασία λίγο μεγαλύτερη από αυτή της θερμοκρασίας αλλαγής φάσης $T_{PCM} > T_{ph}$
- Μετά από χρονικό διάστημα Δt , θεωρούμε οτι στο σημείο $x = 0$ έχουμε τη θερμοκρασία στην οποία γίνεται η μεταφορά θερμότητας T_{unload} .

Λόγω της μικρής τιμής της θερμοχωρητικότητας, παρατηρούμε οτι οι μεταβολές της θερμοκρασίας είναι γραμμικές. Η θερμοροή στην διεπιφάνεια συναρτήσει της μετατόπισης θα είναι :

$$q(s) = \lambda \cdot \frac{T_{ph} - T_{unload}}{s} \quad \text{εξ. 2.1}$$

Η εξάρτηση της θερμοροής από τη μετατόπιση της διεπιφάνειας της αλλαγής φάσης, είναι χρήσιμη σε περιπτώσεις όπου η πλάκα P.C.M. έχει πεπερασμένες διαστάσεις. Αν η θερμότητα παράγεται ή απορροφάται από μια πλευρά, και αν η μεταβλητή s είναι ίση με το πάχος της πλάκας του P.C.M., τότε $q(s)$ είναι η ροή θερμότητας στο τέλος της αλλαγής φάσης και σε εκείνο το σημείο θα έχει την κατώτερη τιμή της. Η θερμοροή στη διεπιφάνεια θα είναι ίση με τη θερμότητα η οποία απελευθερώνεται καθώς η διεπιφάνεια αλλαγής φάσης κινείται, η θερμοροή αυτή θα είναι :

$$q(t) = \Delta H \cdot \frac{ds}{dt} \quad \text{εξ. 2.2}$$

Από τις εξισώσεις 2.1 & 2.2 θα έχουμε αντίστοιχα :

$$q(t) = q(s) \Leftrightarrow \frac{\Delta H \cdot \frac{ds}{dt} = \lambda \cdot \frac{T_{ph} - T_{unload}}{s}}$$

Ολοκληρώνοντας κατά μέλη τις δύο εξισώσεις συναρτήσει του χρόνου και της μετατόπισης θα έχουμε :

$$\int_{s(t=0)}^{s(t=t)} s \cdot ds = \int_{t=0}^{t=t} \left(\lambda \cdot \frac{T_{ph} - T_{unload}}{\Delta H} dt \right) \Leftrightarrow$$

$$\frac{1}{2} \cdot s(t)^2 = \lambda \cdot \frac{T_{ph} - T_{unload}}{\Delta H} \cdot t \Leftrightarrow$$

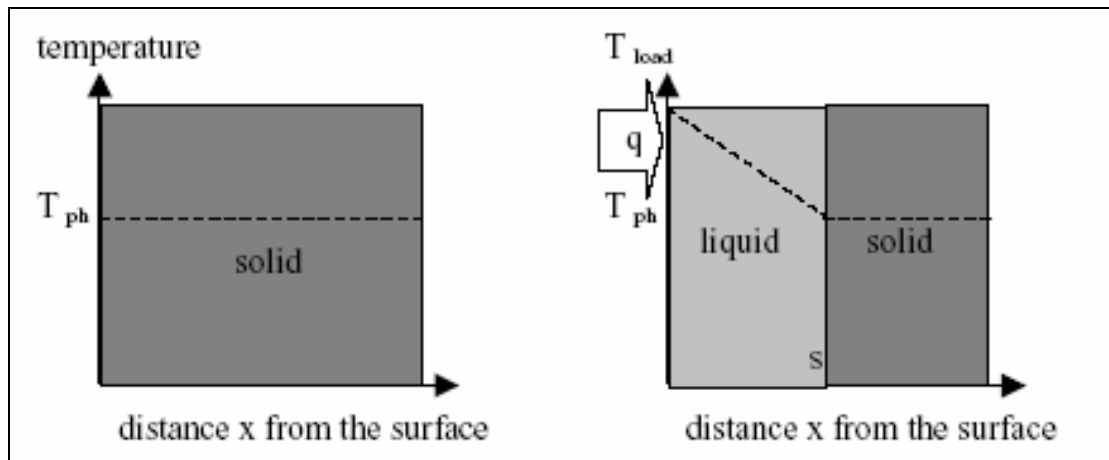
$$s(t) = \sqrt{2 \cdot \lambda \cdot \frac{T_{ph} - T_{unload}}{\Delta H} \cdot t} \quad \text{εξ. 2.3}$$

Από την εξίσωση 2.3 μπορούμε να βρούμε σε κάθε χρονική στιγμή τη θέση της διεπιφάνειας της αλλαγής φάσης. Αντικαθιστώντας στην εξίσωση 2.1 την εξίσωση 2.3 λαμβάνουμε την θερμοροή συναρτήσει του χρόνου, οπότε θα έχουμε :

$$\left. \begin{array}{l} q(s) = \lambda \cdot \frac{T_{ph} - T_{unload}}{s} \\ s(t) = \sqrt{2 \cdot \lambda \cdot \frac{T_{ph} - T_{unload}}{\Delta H} \cdot t} \end{array} \right\} \Leftrightarrow q(t) = \sqrt{\frac{(T_{ph} - T_{unload}) \cdot \Delta H \cdot \lambda}{2 \cdot t}} \quad \text{εξ. 2.4}$$

Από την εξισώσεις 2.3 & 2.4 παρατηρούμε ότι η θερμοροή εξαρτάται από την ενθαλπία αλλαγής φάσης, και μάλιστα όσο μεγαλύτερη είναι η ενθαλπία αλλαγής φάσης τόσο πιο αργά κινείται το μέτωπο αλλαγής φάσης.

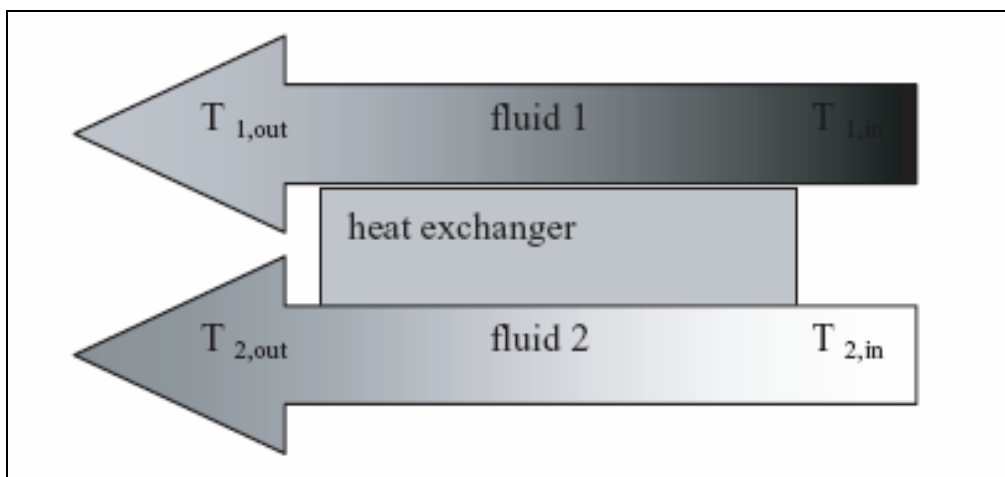
Στην περίπτωση όπου έχουμε θέρμανση αντί για ψύξη αντιστρέφονται οι όροι της διαφοράς θερμοκρασίας ΔT , δηλ. $\Delta T = T_{unload} - T_{ph}$. Στο σχ. 2.2 φαίνεται το μοντέλο της πλάκας στην περίπτωση της θέρμανσης, αρχικά το P.C.M. είναι σε στερεή κατάσταση και κατόπιν θερμαίνεται και υγροποιείται.



Σχήμα 2.2. Θέρμανση ημιόπειρης επιφάνειας P.C.M. α. Αρχική κατάσταση, β. Κατάσταση μετά από χρονικό διάστημα Δt .

2.2.2 Αναλυτικό μοντέλο για αποθήκευση θερμότητας με P.C.M. (2 - D & 3 - D)

Στην προηγούμενη παράγραφο έγινε η παρουσίαση ενός μοντέλου και οι παράμετροι μεταβάλλονταν σε 1 διάσταση. Στις περισσότερες των περιπτώσεων όμως τα μοντέλα που καλούμαστε να υπολογίσουμε είναι 2 και 3 διαστάσεων, οπότε θα πρέπει να λάβουμε υπ' όψιν μας και τις λοιπές πιθανότητες διαφυγής της θερμότητας. Σε ένα απλό μοντέλο δύο ρευμάτων ομοροής με ένα εναλλάκτη θερμότητας πρέπει να θα έχουμε μετάδοση θερμότητας διαμέσου του εναλλάκτη θερμότητας. Στο σχ. 2.3 που ακολουθεί φαίνεται το μοντέλο ενός εναλλάκτη ομοροής, ο οποίος χρησιμοποιείται για να θερμάνει το ρευστό 1 καθώς διέρχεται το θερμότερο ρευστό 2. Είναι προφανές ότι έχουμε μετάδοση θερμότητας από το ρευστό 2 στο ρευστό 1.



Σχήμα 2.3. Μοντέλο εναλλάκτη θερμότητας που συναλλάσσει θερμότητα το ρευστό 2 στο ρευστό 1
Σημείωση : Οι περιοχές οι οποίες φαίνονται πιο σκούρες στο σχήμα είναι σε

χαμηλότερη θερμοκρασία έναντι των άλλων.

Το ολικό ποσό θερμότητας που μεταφέρεται από το ρευστό 2 στο ρευστό 1 είναι :

$$\dot{Q} = k \cdot A \cdot \Delta T_{lm} \quad \text{εξ. 2.5}$$

Όπου : A : είναι η επιφάνεια συναλλαγής, k : ο ολικός συντελεστής μετάδοσης θερμότητας και ΔT_{lm} : η μέση λογαριθμική διαφορά θερμοκρασίας μεταξύ των ρευστών 1 και 2, η οποία ορίζεται από την ακόλουθη σχέση :

$$\Delta T_{lm} = \frac{\Delta T_{in} - \Delta T_{out}}{\ln \frac{\Delta T_{in}}{\Delta T_{out}}}$$

Επομένως η εξίσωση 2.5 λόγω της παραπάνω σχέσης γράφεται ως εξής :

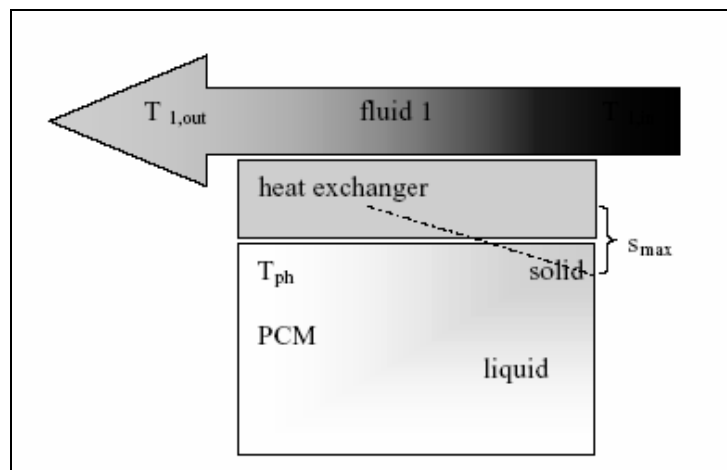
$$\dot{Q} = k \cdot A \cdot \frac{\Delta T_{in} - \Delta T_{out}}{\ln \frac{\Delta T_{in}}{\Delta T_{out}}} \quad \text{εξ. 2.6}$$

Η θερμότητα η οποία μεταφέρεται στο ρευστό 1, θα προκαλέσει αύξηση της θερμοκρασίας του εισερχομένου ρεύματος, οπότε θα έχουμε :

$$\dot{Q} = k \cdot A \cdot \frac{\Delta T_{in} - \Delta T_{out}}{\ln \frac{\Delta T_{in}}{\Delta T_{out}}} = C_p \cdot \dot{V} \cdot \Delta T = C_p \cdot \frac{dV}{dt} \cdot (T_{1,out} - T_{1,in})$$

Όπου C_p είναι η θερμοχωρητικότητα υπό σταθερό όγκο και dV/dt , η ογκοπαροχή του ρευστού 1.

Αν αντικαταστήσουμε το ρευστό 2 με ένα P.C.M., τότε ο εναλλάκτης θερμότητας χρησιμοποιείται για την αποθήκευση θερμότητας στο υλικό αλλαγής φάσης. Στο σχ. 2.4 που ακολουθεί φαίνεται το ρεύμα του ρευστού 1 και η αντικατάσταση του κατωρεύματος του ρευστού 2 από το P.C.M. .



Σχήμα 2.4. Αντικατάσταση του κατωρεύματος του ρευστού 2 με P.C.M. .

Για την απλοποίηση των υπολογισμών θα θεωρήσουμε αρχικά ότι το P.C.M. έχει τη θερμοκρασία αλλαγής φάσης. Αντίστοιχα με παραπάνω η θερμότητα που μεταφέρεται στο P.C.M. θα είναι :

$$\dot{Q} = C_p \cdot \frac{dV}{dt} \cdot (T_{out} - T_{in}) = A \cdot k \cdot \Delta T_{lm} \Leftrightarrow$$

$$\dot{Q} = A \cdot k \cdot \frac{\Delta T_{in} - \Delta T_{out}}{\ln \frac{\Delta T_{in}}{\Delta T_{out}}} \Leftrightarrow$$

$$\dot{Q} = C_p \cdot \frac{dV}{dt} \cdot (T_{out} - T_{in}) = A \cdot k \cdot \frac{(T_{ph} - T_{in}) - (T_{ph} - T_{out})}{\ln \frac{T_{ph} - T_{in}}{T_{ph} - T_{out}}} \Leftrightarrow$$

$$\dot{Q} = C_p \cdot \frac{dV}{dt} \cdot (T_{out} - T_{in}) = A \cdot k \cdot \frac{T_{out} - T_{in}}{\ln \frac{T_{ph} - T_{in}}{T_{ph} - T_{out}}} \Leftrightarrow$$

$$\dot{Q} = C_p \cdot \frac{dV}{dt} = A \cdot k \cdot \frac{1}{\ln \frac{T_{ph} - T_{in}}{T_{ph} - T_{out}}}$$

Αν επιλύσουμε την παραπάνω εξίσωση ως προς τη θερμοκρασία εξόδου T_{out} , τότε θα έχουμε :

$$\ln \frac{T_{ph} - T_{in}}{T_{ph} - T_{out}} = \frac{A \cdot k}{C_p \cdot \frac{dV}{dt}}$$

$$T_{out} - T_{in} = (T_{ph} - T_{in}) \cdot \left[1 - \exp \left(- \frac{A \cdot k}{C_p \cdot \frac{dV}{dt}} \right) \right]$$

Επομένως η θερμική ισχύς που αποθηκεύεται θα είναι :

$$\boxed{\dot{Q} = C_p \cdot \frac{dV}{dt} \cdot (T_{ph} - T_{in}) \cdot \left[1 - \exp \left(- \frac{A \cdot k}{C_p \cdot \frac{dV}{dt}} \right) \right]} \quad \text{εξ. 2.7}$$

Επομένως καταλήγουμε σε μια σχέση στην οποία μπορούμε να υπολογίσουμε την θερμική ισχύ που αποθηκεύεται στο P.C.M. συναρτήσει της γνωστής θερμοκρασίας εισόδου του ρευστού και της θερμοκρασίας αλλαγής φάσης του P.C.M. .

2.3 Υπολογιστικά μοντέλα μετάδοσης θερμότητας σε P.C.M.

2.3.1 Εισαγωγή

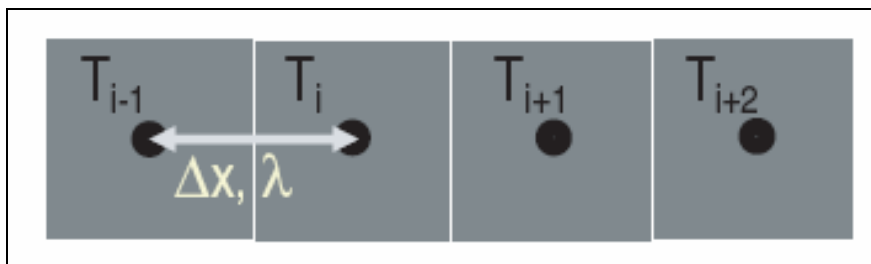
Τα αναλυτικά μοντέλα μας δίνουν αποτελέσματα με χρήση απλών σχέσεων για τον τρόπο της μετάδοσης της θερμότητας. Αυτές οι σχέσεις μας δείχνουν πως οι διάφορες μεταβλητές επηρεάζουν η μια την άλλη και πως τελικά επιδρούν στα μεγέθη που μας ενδιαφέρουν. Ωστόσο τίθενται αυστηροί περιορισμοί όσον αφορά τη γεωμετρία και τη συμβολή του λανθάνοντος ποσού θερμότητας που συναλλάσσεται. Συνεπώς η επίλυση των διαφορικών εξισώσεων γίνεται στα αυστηρά όρια που προαναφέρθηκαν.

Για μια πιο ρεαλιστική ανάλυση των φαινομένων που αναλύονται είναι απαραίτητη προσέγγιση του φαινομένου από διάφορες οπτικές γωνίες, για αυτό λοιπόν χρησιμοποιούνται υπολογιστικές μέθοδοι οι οποίες απλοποιούν τις διαφορικές εξισώσεις που διέπουν το εξεταζόμενο φαινόμενο και είναι δυνατόν να επιλυθούν με χρήση ηλεκτρονικού υπολογιστή.

2.3.2 Μέθοδος πεπερασμένων διαφορών σε P.C.M.

Η μέθοδος των πεπερασμένων διαφορών είναι μια από τις πιο ευρέως διαδεδομένες υπολογιστικές μεθόδους. Η παρουσίαση της μεθόδου θα γίνει με ένα παράδειγμα, μονοδιάστατης ανάλυσης μετάδοσης θερμότητας σε ράβδο.

Αρχικά θεωρούμε ένα τμήμα της ράβδου το οποίο έχουμε διακριτοποιήσει σε όγκους αναφοράς. Στο σχ. 2.5 που ακολουθεί παρουσιάζεται ο διακριτοποιημένος χώρος που έχουμε επιλέξει. Κάθε στοιχείο αντιπροσωπεύεται από ένα κόμβο και σε κάθε κόμβο αποθηκεύεται ενέργεια η οποία συναλλάσσεται με τα γειτονικά στοιχεία.



Σχήμα 2.5. Πεπερασμένα στοιχεία, οι θερμοκρασίες χαρακτηρίζονται από τη μεταβλητή i .

Οι θερμικές ιδιότητες του κάθε κόμβου όγκου ΔV , είναι η θερμοκρασία του T και η θερμοχωρητικότητά του C_p . Το ποσό της μεταφερόμενης θερμότητας από τον ένα κόμβο στο γειτονικό της, με αγωγή, δίνεται από τη σχέση :

$$q = A \cdot \lambda \cdot \frac{\Delta T}{\Delta x} \quad \text{εξ. 2.8}$$

Όπου A : είναι η επιφάνεια συναλλαγής θερμότητας μεταξύ των κόμβων,
 λ : θερμική αγωγιμότητα, ΔT : η θερμοκρασιακή διαφορά μεταξύ δύο γειτονικών κόμβων και Δx : η απόσταση μεταξύ δύο γειτονικών κόμβων.

Η θερμότητα που παράγεται σε κάποιο χρονικό διάστημα t , από τον ένα κόμβο στον άλλο για χρονικό διάστημα Δt , δίνεται από την ακόλουθη σχέση :

$$Q = q \cdot \Delta t \quad \leftarrow \overset{q=A\lambda \cdot \frac{\Delta T}{\Delta x}}{\rightarrow}$$

$$\boxed{Q = \Delta t \cdot A \cdot \lambda \cdot \frac{\Delta T}{\Delta x}} \quad \text{εξ. 2.9}$$

Από τη θερμότητα που συναλλάσσεται, την αρχική θερμοκρασία και τη θερμοχωρητικότητα, μπορούμε να υπολογίσουμε τη θερμοκρασία κάθε επόμενου κόμβου από τον προηγούμενο. Αυτοί οι υπολογισμοί πρέπει να γίνουν μετέτριο τρόπο ώστε να είναι δυνατή η επίλυση των συστημάτων με χρήση ηλεκτρονικού υπολογιστή. Αρχικά αριθμούμε τους κόμβους χρησιμοποιώντας δυο μεταβλητές :

- Η μεταβλητή i υποδηλώνει μετατόπιση κατά Δx
- Η μεταβλητή k υποδηλώνει χρονική μεταβολή κατά Δt

Η θερμότητα η οποία μεταφέρεται από ένα στοιχείο i στα γειτονικά του $i-1$ ή $i+1$, με χρονικό βήμα k , δίνεται από την ακόλουθη σχέση :

$$\boxed{Q_{i,k} = \Delta t \cdot A \cdot \lambda \cdot \left(\frac{T_{i+1,k} - T_{i,k}}{\Delta x} + \frac{T_{i-1,k} - T_{i,k}}{\Delta x} \right)} \quad \text{εξ. 2.10}$$

Η θερμότητα που μεταφέρεται οδηγεί σε θερμοκρασιακή μεταβολή, η οποία είναι :

$$\boxed{Q_{i,k} = \Delta V \cdot C_p \cdot (T_{i,k+1} - T_{i,k})} \quad \text{εξ. 2.11}$$

Επομένως από τις εξισώσεις 2.10 & 2.11, υπολογίζουμε τη θερμοκρασία του κόμβου i τη χρονική στιγμή $k+1$, οπότε θα έχουμε :

$$\left. \begin{aligned} \Delta V \cdot C_p \cdot (T_{i,k+1} - T_{i,k}) &= \Delta t \cdot A \cdot \lambda \cdot \left(\frac{T_{i+1,k} - T_{i,k}}{\Delta x} + \frac{T_{i-1,k} - T_{i,k}}{\Delta x} \right) \\ \Delta V &= A \cdot \Delta x \end{aligned} \right\} \Leftrightarrow$$

$$\underline{T_{i,k+1} = T_{i,k} + \frac{\Delta t \cdot A \cdot \lambda}{C_p \cdot \Delta x^2} \cdot (T_{i+1,k} - 2 \cdot T_{i,k} + T_{i-1,k})}$$

Ο υπολογισμός της θερμοκρασίας με την παραπάνω μέθοδο έγινε γνωρίζοντας τις τιμές των παραμέτρων από το προηγούμενο χρονικό βήμα, η μέθοδος αυτή υπολογισμού ονομάζεται ρητή (*explicit*).

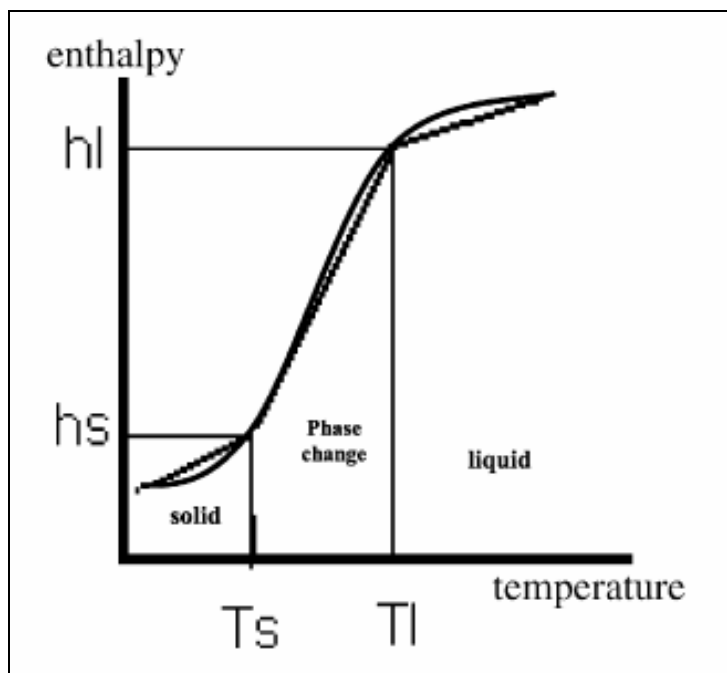
2.3.3 Μέθοδος ενθαλπίας σε P.C.M.

Η ανάλυση των φαινομένων μεταφοράς σε προβλήματα στερεοποίησης και τήξης είναι ιδιαίτερα σύνθετη λόγω του ότι το όριο στερεού – υγρού τμήματος κινείται ανάλογα με την ταχύτητα πρόσδοσης ή απορρόφησης λανθάνουσας θερμότητας και έτσι η θέση του μετώπου αλλαγής φάσης δεν είναι εκ των προτέρων γνωστή. Η μέθοδος ενθαλπίας χρησιμοποιείται στην ανάλυση φαινομένων αλλαγής φάσης σε μονοδιάστατη αγωγή θερμότητας. Βασικό πλεονέκτημα της μεθόδου είναι ότι δεν είναι απαραίτητο να γνωρίζουμε τις οριακές συνθήκες που ισχύουν στο κινούμενο μέτωπο αλλαγής φάσης, γεγονός που σημαίνει ότι μπορούμε να διακριτοποιήσουμε το χώρο εύκολα. Μια από τις πιο αξιόπιστες υπολογιστικές μεθόδους που εφαρμόζονται για να μας δώσουν αποτελέσματα με τη μέθοδο της ενθαλπίας είναι η μέθοδος «υπερπήδησης κόμβων» (*Node jumping*), κατά την οποία το πλέγμα όπως προαναφέρθηκε παραμένει σταθερό και το μέτωπο αλλαγής φάσης βρίσκεται πάντα πάνω σε ορισμένο κόμβο του πλέγματος. Επομένως η χρήση της μεθόδου της ενθαλπίας με τη βοήθεια της «*node jumping technique*» δίνουν αρκετά ακριβή αποτελέσματα.

Η εξίσωση της ενέργειας με όρους ενθαλπίας γράφεται ως εξής :

$$\rho \cdot \frac{\partial H}{\partial t} = \nabla \cdot (\kappa \cdot \nabla T) \quad \text{εξ. 2.12}$$

Όπου H : η ενθαλπία, η οποία εκφράζεται σαν σύνολο λανθάνοντος και αισθητού ποσού θερμότητας, T : η θερμοκρασία, κ : η θερμική αγωγιμότητα και ρ : η πυκνότητα. Η επίλυση αυτής της εξίσωσης απαιτεί τη γνώση της ενθαλπίας και της θερμοκρασίας στην έναρξη και τη λήξη της στερεοποίησης, όπως φαίνεται και στο σχ. 2.6 που ακολουθεί. Επομένως πρέπει να γνωρίζουμε τη διαφορά θερμοκρασίας και τη θερμοχωρητικότητα ώστε να είμαστε σε θέση να γνωρίζουμε την ενθαλπία.



Σχήμα 2.6. Σχέση ενθαλπίας – θερμοκρασίας κατά την αλλαγή φάσης.

Τα κύρια προτερήματα από τη χρήση της εξ. 2.12 είναι τα ακόλουθα :

- Η εξίσωση είναι δυνατόν να εφαρμοσθεί και στις 3 φάσεις
- Η θερμοκρασία είναι προσδιορίσιμη σε κάθε σημείο και τιμή των θερμοφυσικών ιδιοτήτων μπορούν να εκτιμηθούν
- Επιπλέον γνωρίζοντας τις τιμές του θερμοκρασιακού πεδίου, είναι δυνατόν να προσδιορίσουμε τη θέση του ορίου αλλαγής φάσης, αν και αυτό δεν απαιτείται για την επίλυση του προβλήματος.

Η σχέση μεταξύ της θερμοκρασίας και της ενθαλπίας εξαρτάται από τη φύση της αλλαγής φάσης. Έτσι αν εξετάζουμε ένα υλικό το οποίο υφίσταται τήξη – ψύξη, όλο το λανθάνον ποσό θερμότητας συναλλάσσεται σε μια συγκεκριμένη θερμοκρασία την $T = T_{ph}$, οπότε θα έχουμε :

$$H = \begin{cases} C \cdot T & T < T_{ph} \\ C \cdot T + L & T > T_{ph} \end{cases} \quad \text{εξ. 2.13}$$

Όπου C : είναι η αισθητή θερμότητα και L : η λανθάνουσα θερμότητα. Ένας εναλλακτικός τρόπος γραφής της εξίσωσης της ενέργειας (εξ. 2.12), με όρους λανθάνουσας και αισθητής θερμότητας είναι ο ακόλουθος :

$$\rho \cdot \frac{\partial h}{\partial t} = \vec{\nabla} \cdot (k \cdot \vec{\nabla} h) + S \quad \text{εξ. 2.14}$$

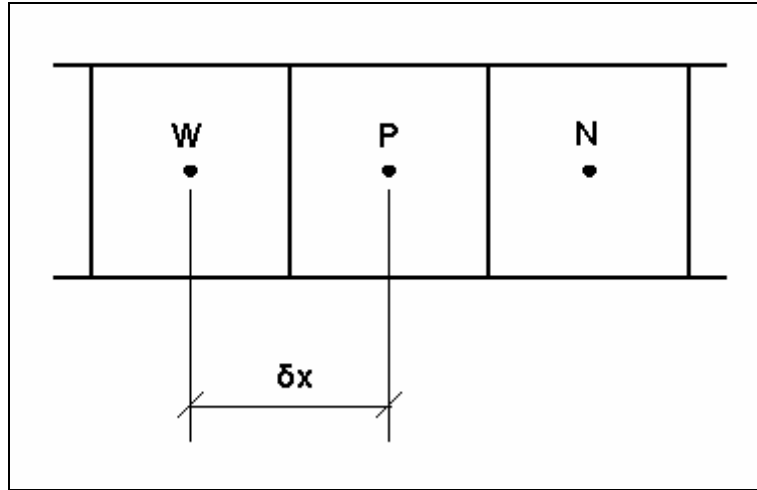
Όπου : h : η αισθητή ενθαλπία, όπου $h = C \cdot T$, k : η διαχυσιμότητα, όπου $k = \frac{\kappa}{C \cdot \rho}$

και S : ο όρος της λανθάνουσας θερμότητας, όπου $S = \frac{\partial(\Delta H)}{\partial t}$. Ο όρος ΔH είναι το

λανθάνον ποσό θερμότητας που συναλλάσσεται κατά την αλλαγή φάσης. Η συναρτησιακή σχέση του ΔH με τη θερμοκρασία εξαρτάται από τη φύση της αλλαγής φάσης, έτσι όμοια με την εξίσωση 2.13, θα έχουμε :

$$\Delta H = \begin{cases} 0 & T < T_{ph} \\ L & T > T_{ph} \end{cases} \quad \text{εξ. 2.15}$$

Η επίλυση της εξίσωσης 2.13 γίνεται με υπολογιστικές μεθόδους. Για την καλύτερη παρουσίαση της μεθόδου θεωρούμε μονοδιάστατη αγωγή θερμότητας και η επίλυση θα γίνει με τη μέθοδο των πεπερασμένων όγκων. Αρχικά διακριτοποιούμε το χώρο σε κόμβους και στον κάθε κόμβο αντιστοιχεί ένας πεπερασμένος όγκος. Στο σχ. 2.7 που ακολουθεί φαίνονται 3 πεπερασμένοι όγκοι με έναν κεντρικό κόμβο (P) και δυο ομόρους (W & E), οι οποίοι έχουν σταθερό διάστημα μεταξύ τους Δx .



Σχήμα 2.7. Πεπερασμένοι όγκοι .

Σύμφωνα με το σχ. 2.7, η εξίσωση 2.13 με χρήση των πεπερασμένων διαφορών γράφεται ως εξής :

$$h_p - h_p^* = \frac{\delta t}{\delta x^2} \cdot (1 - \theta) \cdot F_p^* + \frac{\partial t}{\delta x^2} \cdot \theta \cdot F_p + S_p \quad \text{εξ. 2.16}$$

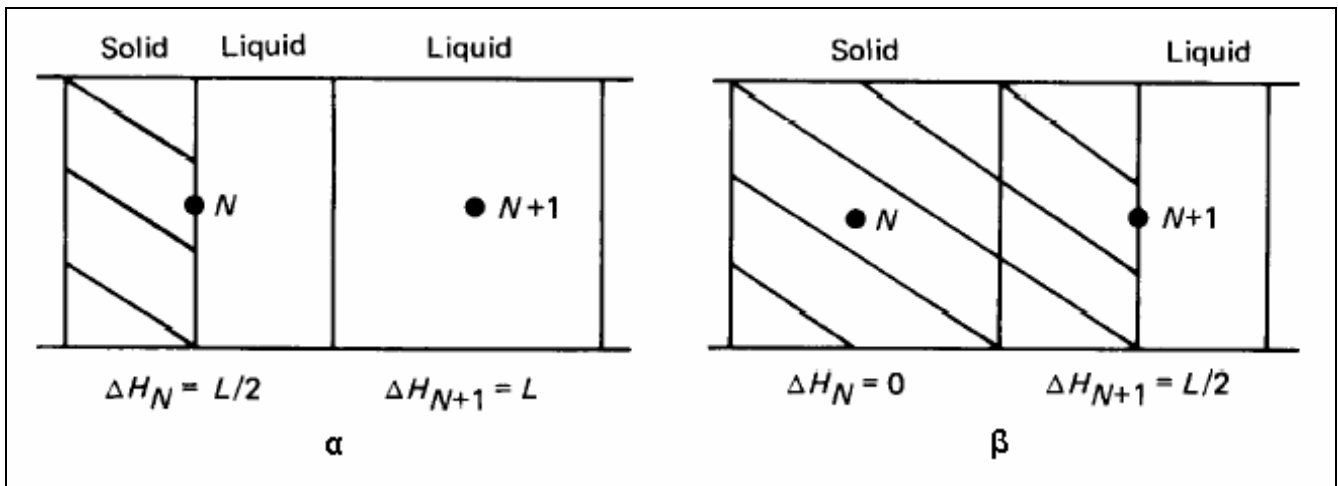
Όπου : $F_p = \kappa_w \cdot (h_w - h_p) - \kappa_e \cdot (h_p - h_E)$ και $S_p = \Delta T_p^* - \Delta H_p^*$. Οι τιμές οι οποίες είναι σημειωμένες με (*), δηλώνουν τις τιμές των μεγεθών την προηγούμενη χρονική στιγμή. Η παράμετρος θ , λαμβάνει τιμές, $\theta \in [0,1]$ και όταν $\theta=0$ τότε η μέθοδος είναι ρητή ενώ όταν $\theta=1$ η μέθοδος είναι πεπλεγμένη. Η τιμή του όρου S_p , δίνει την τιμή της κομβικής μεταβολής της λανθάνουσας θερμότητας ΔH_p σε κάθε χρονικό βήμα, και η τιμή αυτή είναι σχετική με το ποσό θερμότητας που συναλλάσσεται καθώς ο όγκος αναφοράς αλλάζει κατάσταση από τη μια χρονική στιγμή στην άλλη.

Ας θεωρήσουμε ότι σε μια χρονική στιγμή t , η διεπιφάνεια αλλαγής φάσης βρίσκεται στον κόμβο N. Για το συγκεκριμένο όγκο αναφοράς, κατά το ήμισυ θα είναι σε υγρή φάση και το υπόλοιπο θα είναι σε στερεά φάση. Στην περιοχή που είναι στερεό το ποσό λανθάνουσας θερμότητας θα είναι μηδενικό ενώ εκεί που έχουμε υγρή φάση το ποσό λανθάνουσας θερμότητας θα είναι L . Τα παραπάνω φαίνονται στο σχ. 2.8α που ακολουθεί. Επομένως το λανθάνον ποσό θερμότητας τη χρονική στιγμή t , θα είναι :

$$\Delta H_N^* = \frac{L}{2}$$

Αν μετά από χρονικό διάστημα $t + \Delta t$, η διεπιφάνεια αλλαγής φάσης έχει μετακινηθεί κατά Δx , τότε στον κόμβο N + 1, (σχ. 2.8β) το λανθάνον ποσό θερμότητας θα είναι αντίστοιχα :

$$\Delta H_{N+1} = \frac{L}{2}$$



Σχήμα 2.8. Διεργασία αλλαγής φάσης στους όγκους αναφοράς, α. τη χρονική στιγμή t , β. τη χρονική στιγμή $t + \Delta t$.

Άρα η τιμή της κομβικής ενθαλπική διαφοράς τις χρονικές στιγμές t και $t + \Delta t$, θα είναι αντίστοιχα :

$$\underline{S_N = \Delta H_N^* - \Delta H_N = \frac{L}{2}} \quad \text{και} \quad \underline{S_{N+1} = \Delta H_{N+1}^* - \Delta H_{N+1} = \frac{L}{2}}$$

Έτσι αν επιλέγουμε το χρονικό βήμα με τέτοιο τρόπο ώστε να εξασφαλίζουμε ότι η επιφάνεια αλλαγής φάσης σε χρονικό διάστημα Δt κινείται κατά Δx , δηλαδή από κόμβο σε κόμβο, τότε μπορούμε να γράψουμε ότι αν ο κόμβος N είναι στην αρχή ο κόμβος N + 1 θα είναι στο τέλος και συνεπώς για το συναλλασσόμενο λανθάνον ποσό θερμότητας θα έχουμε :

$$S_p = \begin{cases} \frac{L}{2} & P = N \text{ \& } P = N + 1 \\ 0 & \text{αλλιώς} \end{cases}$$

Το γεγονός αυτό μας διευκολύνει στην επίλυση της εξίσωσης 2.16, με τον αλγόριθμο του τριδιαγώνιου πίνακα. Το μόνο άγνωστο στοιχείο είναι το χρονικό βήμα που πρέπει να προσδιορισθεί από κόμβο σε κόμβο. Το χρονικό βήμα μπορεί να προσεγγισθεί με επαναληπτική διαδικασία, από το ένα χρονικό βήμα στο επόμενο. Το σημείο σύγκλισης αυτής της διαδικασίας θα είναι όταν στον κόμβο N+1, έχουμε στερεοποίηση και τότε η τιμή της ενθαλπίας θα είναι :

$$h_{N+1} = C \cdot T_{ph}$$

Συνοπτικά τα βήματα που πρέπει να ακολουθηθούν για την επίλυση του προβλήματος με τη μέθοδο « *Node jumping* », είναι τα ακόλουθα :

- Η διεπιφάνεια αλλαγής φάσης τη χρονική στιγμή t , βρίσκεται στον κόμβο N
- Θεωρούμε κάποιο χρονικό βήμα Δt
- Ορίζουμε ότι, $S_N = L / 2$ και $S_{N+1} = L / 2$ αλλιώς $S_i = 0$
- Επιλύουμε την εξίσωση 2.16, ως προς την κομβική τιμή της ενθαλπίας
- Ελέγχουμε αν ισχύει το κριτήριο σύγκλισης που έχουμε θέσει ($h_{N+1} - C \cdot T_{ph} \ll 0$), αν δεν ισχύει τότε αλλάζουμε το χρονικό βήμα και επαναλαμβάνουμε τη διαδικασία..

Κεφάλαιο 3^ο

Εισαγωγή στο σχεδιαστικό πακέτο Gambit

3.1 Εισαγωγή

Το σχεδιαστικό πακέτο Gambit, είναι ένα λογισμικό, στο οποίο ο σχεδιαστής όπου θέλει να προσομοιώσει ένα μοντέλο για ένα φαινόμενο, μπορεί να σχεδιάσει το μοντέλο, να κατασκευάσει το πλέγμα του ώστε στη συνέχεια να είναι σε θέση να επιλύσει φαινόμενα ροής ρευστών, μεταφοράς θερμότητας και άλλες επιστημονικές εφαρμογές.

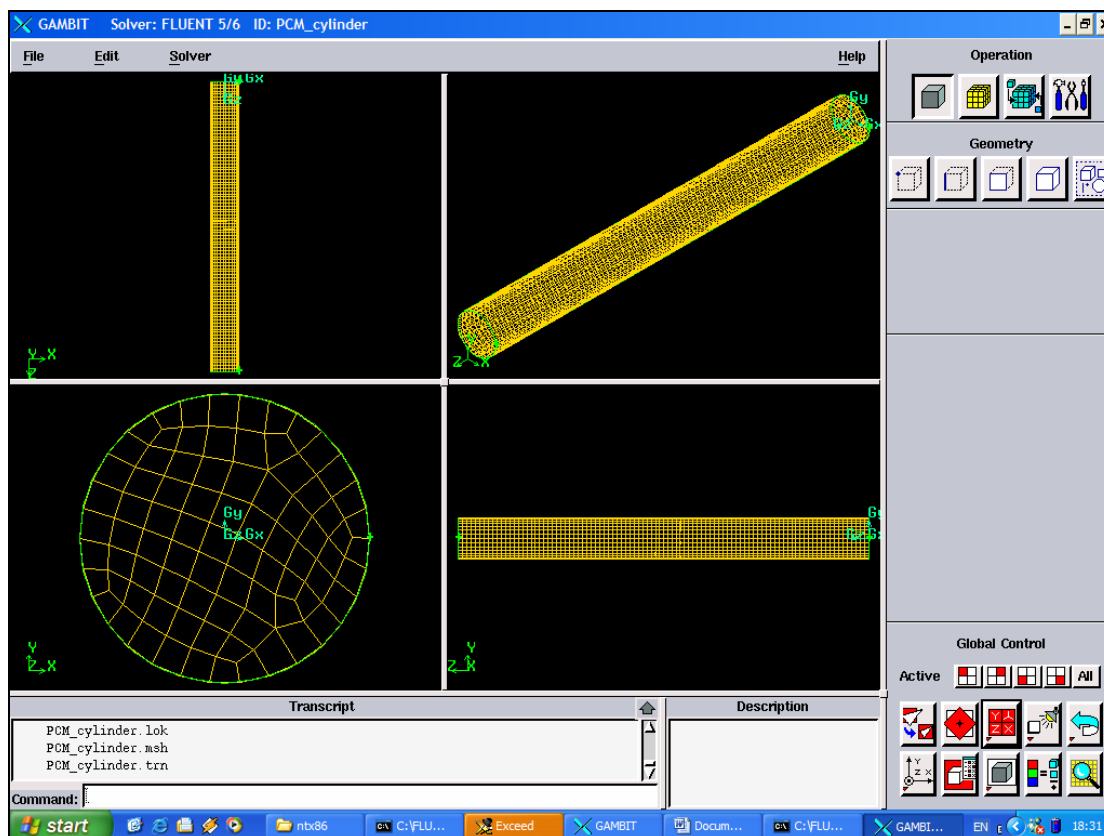
Το αντικείμενο κατασκευής της διπλωματικής εργασίας είναι ένας σωλήνας μηδενικού πάχους (κύλινδρος) , στον οποίο εμπεριέχεται ένα υλικό αλλαγής φάσης. Το σχεδιαστικό τμήμα επομένως στο Gambit είναι αρκετά απλό και θα ακολουθήσει η δημιουργία του πλέγματος στο εσωτερικό του κυλίνδρου.

Στις παραγράφους που ακολουθούν δίνεται μια εποπτική άποψη για τη χρήση του προγράμματος και περιγράφονται αναλυτικά τα βήματα που πραγματοποιήθηκαν για την κατασκευή του μοντέλου του κυλίνδρου. Οι βασικές λειτουργίες (*operations*) του προγράμματος οι οποίες θα αναλυθούν είναι οι εξής :

- Εντολές που αφορούν τη γεωμετρία (*Geometry command button*)
- Εντολές που αφορούν το πλέγμα (*Mesh command button*)
- Εντολές που αφορούν τις οριακές συνθήκες (*Zone command button*)

3.2 Επιφάνεια εργασίας γραφικών

Η αρχική εικόνα που παρουσιάζεται κατά τη έναρξη του προγράμματος είναι η επιφάνεια εργασίας γραφικών (*graphical user interface*). Ο σχεδιασμός του υπό κατασκευή αντικειμένου, η δημιουργία πλέγματος καθώς και ο προσδιορισμός οριακών συνθηκών πραγματοποιείται στην επιφάνεια εργασίας γραφικών. Στο σχ.3.1 φαίνεται η επιφάνεια εργασίας του Gambit, για τον κύλινδρο στον οποίο έχει γίνει η επιλογή πλέγματος.



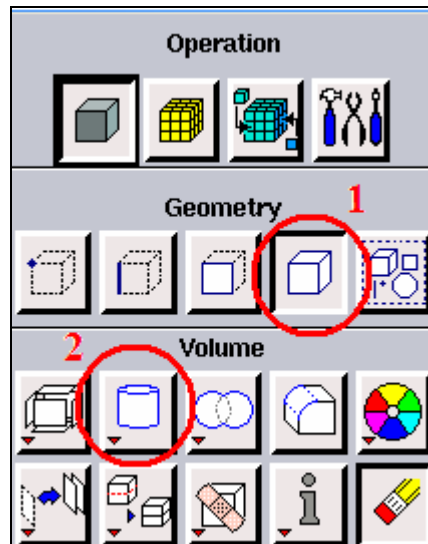
Σχήμα 3.1. Επιφάνεια εργασίας Gambit, μοντέλο σωλήνα με P.C.M.

Η γραμμή εργαλείων και λειτουργιών (*operation tool pad*) αποτελείται από τα εξής επιμέρους τμήματα :

- Γεωμετρία (*Geometry*) : Με το πλήκτρο αυτό, ενεργοποιούνται τα εργαλεία με τα οποία κατασκευάζεται ένα γεωμετρικό σχήμα, στην προκειμένη περίπτωση το μοντέλο που μελετάμε.
- Πλέγμα (*Mesh*) : Με το πλήκτρο αυτό, ενεργοποιούνται τα εργαλεία με τα οποία κατασκευάζουμε και επιλέγουμε το πλέγμα το οποίο θα χρησιμοποιήσουμε στη γεωμετρία που κατασκευάσαμε στο προηγούμενο στάδιο.
- Ζώνες (*Zones*) : Με το πλήκτρο αυτό, ενεργοποιούνται τα εργαλεία με τα οποία προσδιορίζουμε τις οριακές συνθήκες του μοντέλου.

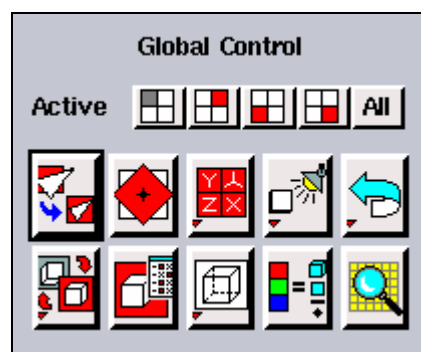
- Εργαλεία (*Tools*) : Με το πλήκτρο αυτό, ενεργοποιείται η γραμμή εργαλείων από την οποία είναι δυνατόν να δημιουργήσουμε ή να μετατρέψουμε συστήματα συντεταγμένων καθώς και πλέγματα.

Η γραμμή εργαλείων για την κατασκευή συγκεκριμένης γεωμετρίας φαίνεται στο σχ. 3.2 . Όπως φαίνεται είναι «μαρκαρισμένη» η επιλογή όγκος (*volume*), γιατί με αυτή την επιλογή κατασκευάσουμε πρισματικά σχήματα, όπως ο κύλινδρος.



Σχήμα 3.2. Το «μενού της γεωμετρίας» και η επιλογή σχεδίασης όγκου (βήμα 1 & 2)

Επιπλέον στην αρχική επιφάνεια εργασίας του Gambit, βλέπουμε και την γραμμή εργαλείων κεντρικού ελέγχου (*global control toolbar*), η οποία φαίνεται στο σχ. 3.3 που ακολουθεί.



Σχήμα 3.3. Η γραμμή εργαλείων κεντρικού ελέγχου του Gambit

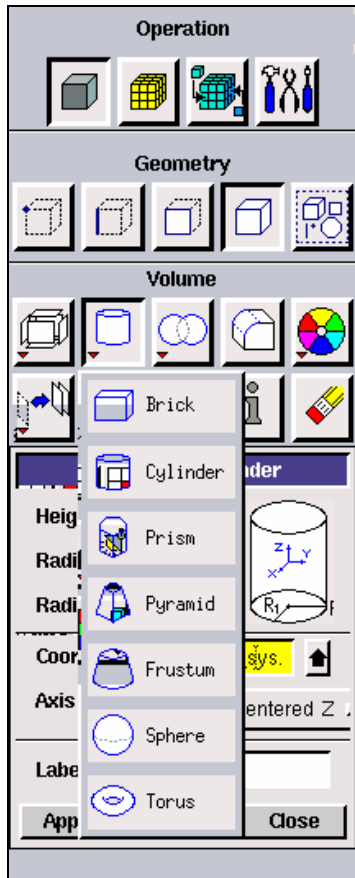
Η γραμμή εργαλείων κεντρικού ελέγχου αποτελείται από τις εξής επιμέρους λειτουργίες :

1. *Fit to window* : Προσαρμόζει το μοντέλο που έχουμε κατασκευάσει ώστε να καταλαμβάνει όλη την επιφάνεια εργασίας γραφικών.
2. *Select pivot* : Καθορίζει ένα σημείο, γύρω από το οποίο μπορούμε να περιστρέψουμε το γεωμετρικό μοντέλο μας.

3. *Select preset configuration* : Χωρίζει την επιφάνεια εργασίας σε τέσσερα ίσα τμήματα στα οποία το μοντέλο έχει διαφορετικό προσανατολισμό, υπάρχει η επιλογή να διαλέξουμε ένα από τα τέσσερα μοντέλα και αυτό να καταλαμβάνει όλη την επιφάνεια εργασίας γραφικών.
4. *Modify lights* : Ρυθμίζει την ένταση του φωτισμού προς το γεωμετρικό μοντέλο.
5. *Annotate* : Δίνεται η δυνατότητα τοποθέτησης σχολίων στο σχέδιο με χρήση γραμμών και βελών.
6. *Undo – Redo* : Αναίρεση της τελευταίας εντολής – Επαναφορά της τελευταίας εντολής.
7. *Orient model* : Προσανατολίζει τη γεωμετρία σύμφωνα με το σύστημα συντεταγμένων που ορίζουμε εμείς.
8. *Specify display attributes* : Μας επιτρέπει να ορίσουμε ποια χαρακτηριστικά της γεωμετρίας θα παρουσιάζονται στην οθόνη γραφικών, όπως, κόμβοι, ακμές, επιφάνειες.
9. *Render model* : Ορίζει αν στο μοντέλο θα φαίνεται το πλέγμα ή όχι, αν θα είναι σκιασμένο, ή αν θα φαίνονται ακμές.
10. *Specify color mode* : Καθορίζει το χρωματισμό των διαφόρων συνιστωσών της γεωμετρικής μας κατασκευής.
11. *Examine mesh* : Επιτρέπει τον έλεγχο του πλέγματος.

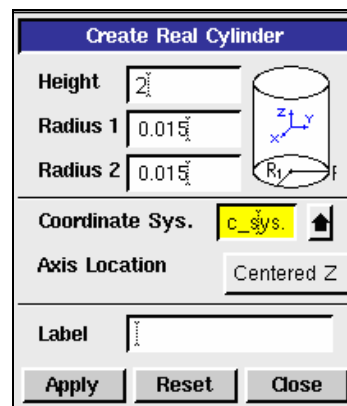
3.3 Σχεδιασμός του γεωμετρικού μοντέλου του κυλίνδρου

Σε αυτή την παράγραφο παρατίθενται τα βήματα τα οποία πραγματοποιήθηκαν προκειμένου να σχεδιασθεί ο κύλινδρος, για την προσομοίωση του φαινομένου που μελετάμε. Ο σχεδιασμός του γεωμετρικού μοντέλου είναι ένας επιμήκης κύλινδρος ο οποίος έχει διαστάσεις έχει μήκος 2m και ακτίνα 15 mm. Η διαδικασία κατασκευής είναι η ακόλουθη :



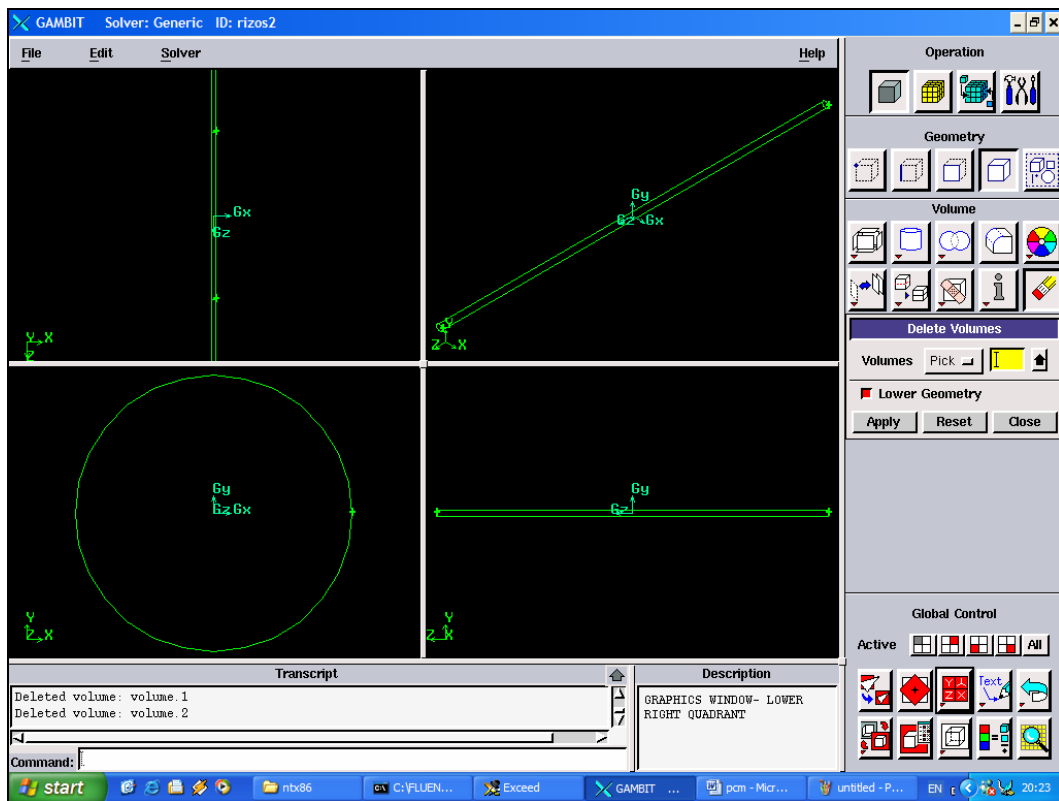
Σχήμα 3.4. Πορεία κατασκευής κυλίνδρου

Από τη γραμμή εργαλείων λειτουργιών του Gambit, ακολουθούμε την πορεία του σχ. 3.4 : *Geometry* → *Volume* → *Cylinder*. Κατόπιν όπως φαίνεται στο σχ.3.5 εμφανίζεται το «μενού» για την κατασκευή του κυλίνδρου. Εκεί τοποθετούμε τις διαστάσεις Ύψους – Ακτίνα R_1 – Ακτίνα R_2 (στην περίπτωση μας $R_1 = R_2$, διότι διαφορετικά η διατομή του κυλίνδρου θα ήταν ελλειπτική). Ακόμα επιλέγουμε τον προσανατολισμό του κυλίνδρου να είναι προς τα θετικά του άξονα z.



Σχήμα 3.5. Διαστάσεις κυλίνδρου











Η τελική μορφή του γεωμετρικού μοντέλου φαίνεται στο σχ.3.6 που ακολουθεί :



Σχήμα 3.6. Γεωμετρικό μοντέλο κυλίνδρου.

3.4 Δημιουργία υπολογιστικού πλέγματος στο γεωμετρικό μοντέλο

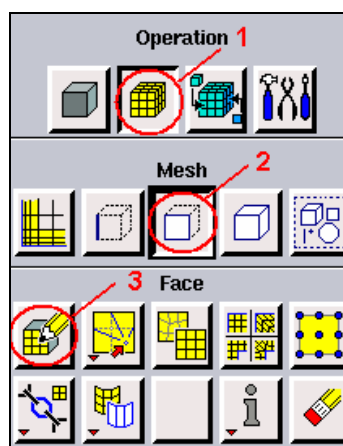
Για την κατασκευή του υπολογιστικού πλέγματος στη γεωμετρία που έχουμε κατασκευάσει δίνονται οι εξής δυνατότητες από το πρόγραμμα :

- Δημιουργία υπολογιστικού πλέγματος σε οριακό στρώμα  → 
- Δημιουργία υπολογιστικού πλέγματος σε ακμή  → 
- Δημιουργία υπολογιστικού πλέγματος σε επιφάνεια  → 
- Δημιουργία υπολογιστικού πλέγματος σε όγκο  → 
- Δημιουργία υπολογιστικού πλέγματος σε ομάδα ακμών, επιφανειών και όγκων  → 

Για τις ανάγκες κατασκευής του υπολογιστικού πλέγματος της γεωμετρίας του κυλίνδρου, θα χρησιμοποιήσουμε τις επιλογές δημιουργίας υπολογιστικού πλέγματος σε επιφάνειες, στις δυο κυκλικές επιφάνειες του κυλίνδρου ακτίνας $r = 0.015$ m και δημιουργία υπολογιστικού πλέγματος όγκου στην παράπλευρη επιφάνεια του κυλίνδρου ύψους $h = 2$ m. Η διαδικασία κατασκευής του πλέγματος περιγράφεται στα βήματα που ακολουθούν.

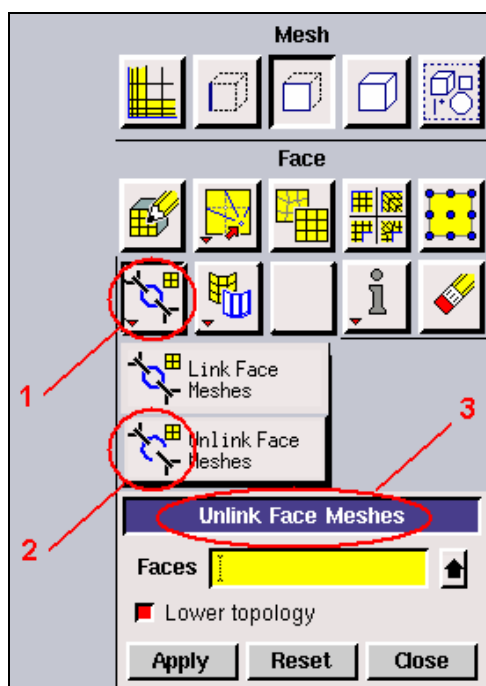
3.4.1 Δημιουργία υπολογιστικού πλέγματος σε επιφάνειες

Η εντολή δημιουργίας υπολογιστικού πλέγματος σε επιφάνεια μας δίνει τη δυνατότητα να εισάγουμε ή να τροποποιήσουμε το υπολογιστικό πλέγμα στην εν λόγω επιφάνεια. Όταν επιλέγουμε να δημιουργήσουμε υπολογιστικό πλέγμα σε επιφάνεια, παρουσιάζεται η εικόνα που φαίνεται στο *σχ. 3.7* που ακολουθεί.



Σχήμα 3.7. Το υπο-μενού δημιουργίας πλέγματος σε επιφάνεια (βήματα : 1, 2 , 3)

Από αυτό το μενού η δημιουργία του πλέγματος γίνεται ουσιαστικά από το συνδυασμό τριών συνιστωσών. Αρχικά επιλέγουμε την εντολή της αποσύνδεσης των επιφανειών που θα χρησιμοποιήσουμε, δηλαδή διαχωρίζουμε τον όγκο του κυλίνδρου σε τρεις επιφάνειες : βάσης, κορυφής και την παράπλευρη επιφάνεια, τις οποίες ονοματίζουμε αντίστοιχα ως *face1.*, *face2.* και *face3.* αντίστοιχα. Η επιλογή φαίνεται στο σχ.3.8 που ακολουθεί.



Σχήμα 3.8. Το υπο-μενού αποσύνδεσης επιφανειών στο γεωμετρικό μοντέλο (βήματα : 1, 2 , 3)

Η παραπάνω διαδικασία γίνεται διότι ουσιαστικά η κατασκευή του πλέγματος κατά μήκος του κυλίνδρου σε κάθε τομή θα πρέπει να είναι ομοιόμορφη και ίδια με αυτή που επιλέχθηκε στις δύο επιφάνειες βάσης και κορυφής. Η διαδικασία περιγραφής του πλέγματος στην παράπλευρη επιφάνεια αντιμετωπίζεται με διαφορετικό τρόπο και αναφέρεται παρακάτω.

Η εντολή της δημιουργίας πλέγματος σε επιφάνεια συνοδεύεται από μια σειρά παραμέτρων τις οποίες πρέπει να λάβουμε υπ' όψη προκειμένου να κατασκευάσουμε το πλέγμα στις επιφάνειες 1 & 2. Το «παράθυρο» που εμφανίζεται κατά την επιλογή αυτή φαίνεται στο σχ. 3.9 , οι παράμετροι είναι οι κάτωθι :

- *Faces* : επιλέγουμε τις επιφάνειες στις οποίες επιθυμούμε να κατασκευάσουμε το υπολογιστικό πλέγμα.
- *Scheme / Elements / Type* : αφορούν τα στοιχεία που αποτελούν το πλέγμα και τη διάταξή τους στο υπολογιστικό πλέγμα
- *Spacing* : απόσταση μεταξύ κόμβων των στοιχείων
- *Options* : διάφορες επιλογές που αφορούν το υπολογιστικό πλέγμα



Σχήμα 3.9. «Παράθυρο» που εμφανίζεται κατά τη επιλογή της δημιουργίας υπολογιστικού πλέγματος σε επιφάνεια.

Ένα σημαντικό στοιχείο που είναι αναγκαίο, είναι η επιλογή του σχήματος των επιμέρους στοιχείων που αποτελούν το υπολογιστικό πλέγμα. Το Gambit δίνει τρεις επιλογές για τα στοιχεία που παρουσιάζονται στον Πιν. 3.1 :

Επιλογή Στοιχείου (Elements)	Περιγραφή
<i>Quad</i>	Η επιφάνεια στην οποία θα κατασκευάσουμε υπολογιστικό πλέγμα θα αποτελείται από τετραγωνικά στοιχεία.
<i>Tri</i>	Η επιφάνεια στην οποία θα κατασκευάσουμε υπολογιστικό πλέγμα θα αποτελείται από τριγωνικά στοιχεία.
<i>Quad / Tri</i>	Η επιφάνεια στην οποία θα κατασκευάσουμε υπολογιστικό πλέγμα θα αποτελείται από τετραγωνικά στοιχεία κυρίως στο εσωτερικό της, ενώ όσο κατευθυνόμαστε σε γωνιακά σημεία θα χρησιμοποιούνται τριγωνικά στοιχεία.

Πίνακας 3.1. Περιγραφή των στοιχείων που χρησιμοποιούνται για την κατασκευή υπολογιστικού πλέγματος σε επιφάνεια.

Επιπλέον ένα άλλο σημαντικό στοιχείο, είναι η επιλογή του τύπου του υπολογιστικού πλέγματος. Το Gambit δίνει τις ακόλουθες επιλογές, οι οποίες παρατίθενται στον Πιν. 3.2 :

<i>Επιλογή Τύπου Υ.Π. (Type)</i>	<i>Περιγραφή</i>
<i>Map</i>	Δημιουργία κανονικού, δομημένου υπολογιστικού πλέγματος.
<i>Submap</i>	Πραγματοποιείται διαίρεση μιας μη διακριτοποιημένης επιφάνειας σε διακριτές περιοχές και δημιουργείται ένα δομημένο υπολογιστικό πλέγμα σε κάθε μία από τις διακριτές περιοχές.
<i>Pave</i>	Δημιουργία ενός μη δομημένου υπολογιστικού πλέγματος.
<i>Tri Primitive</i>	Πραγματοποιείται διαίρεση μιας τρίπλευρης επιφάνειας σε τρεις τετράπλευρες περιοχές και δημιουργείται ένα δομημένο υπολογιστικό πλέγμα σε κάθε μια από τις διακριτές περιοχές.
<i>Wedge Primitive</i>	Πραγματοποιείται δημιουργία τριγωνικών στοιχείων στην άκρη μιας σφηνοειδούς επιφάνειας και δημιουργείται ένα ακτινικό υπολογιστικό πλέγμα εσωτερικά της σφηνοειδούς επιφάνειας.

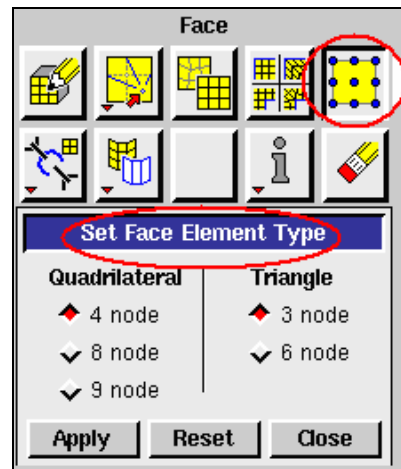
Πίνακας 3.2. Περιγραφή των τύπων των υπολογιστικών πλεγμάτων σε επιφάνεια

Οι δυνατοί συνδυασμοί για το είδος του στοιχείου που θα χρησιμοποιηθεί και το είδος του υπολογιστικού πλέγματος φαίνονται παρακάτω Πιν. 3.3 :

Type	Elements		
	Quad	Tri	Quad/Tri
Map	×		×
Submap	×		
Pave	×	×	×
Tri Primitive	×		
Wedge Primitive			×

Πίνακας 3.3. Δυνατοί συνδυασμοί, είδους στοιχείου και τύπου υπολογιστικού πλέγματος σε επιφάνεια

Μια άλλη παράμετρος που είναι εξίσου σημαντική είναι η επιλογή τύπου στοιχείων. Η παράμετρος καθορίζει τον αριθμό των κόμβων σε κάθε είδος στοιχείο που χρησιμοποιούμε, είτε αυτό είναι τετράπλευρο ή τριγωνικό. Η μορφή που αναμένεται να παρατηρήσουμε στο πρόγραμμα παρουσιάζεται στο σχ. 3.10.



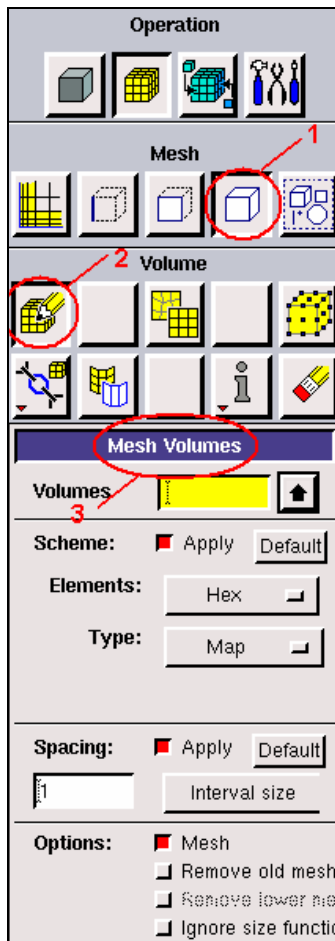
Σχήμα 3.10. Επιλογή κόμβων ανά στοιχείο, τετραγωνικό ή τριγωνικό.

3.4.2 Δημιουργία υπολογιστικού πλέγματος σε όγκο

Η εντολή δημιουργίας υπολογιστικού πλέγματος σε όγκο μας δίνει τη δυνατότητα να εισάγουμε ή να τροποποιήσουμε το υπολογιστικό πλέγμα σε γεωμετρίες τριών διαστάσεων. Η διαδικασία δημιουργίας πλέγματος παρουσιάζει ομοιότητες σε σχέση με αυτή που προαναφέρθηκε στην προηγούμενη παράγραφο, συνεπώς θα επικεντρωθούμε στα δεδομένα που διαφοροποιούνται.

Η εντολή της δημιουργίας πλέγματος σε όγκο συνοδεύεται από μια σειρά παραμέτρων τις οποίες πρέπει να λάβουμε υπ' όψη προκειμένου να κατασκευάσουμε το πλέγμα στον όγκο του κυλίνδρου. Το «παράθυρο» που εμφανίζεται κατά την επιλογή αυτή φαίνεται στο σχ. 3.11, οι παράμετροι είναι οι κάτωθι :

- *Volumes*: επιλέγουμε τους όγκους στους οποίους θα κατασκευάσουμε το υπολογιστικό πλέγμα.
- *Scheme / Elements / Type* : αφορούν τα στοιχεία που αποτελούν το πλέγμα και τη διάταξή τους στο υπολογιστικό πλέγμα
- *Spacing* : απόσταση μεταξύ κόμβων των στοιχείων
- *Options* : διάφορες επιλογές που αφορούν το υπολογιστικό πλέγμα



Σχήμα 3.11. «Παράθυρο» που εμφανίζεται κατά τη επιλογή της δημιουργίας υπολογιστικού πλέγματος σε όγκο.

Στην επιλογή του υπολογιστικού πλέγματος σε όγκο είναι σκόπιμο να επιλέξουμε το σχήμα των στοιχείων που το απαρτίζουν. Το Gambit δίνει τρεις επιλογές για τα στοιχεία, όπως φαίνεται στον Πιν.3.4 :

Επιλογή Στοιχείου (Elements)	Περιγραφή
<i>Hex</i>	Ο όγκος στον οποίο θα κατασκευάσουμε υπολογιστικό πλέγμα θα αποτελείται από εξαεδρικά στοιχεία.
<i>Hex/Wedge</i>	Ο όγκος στον οποίο θα κατασκευάσουμε υπολογιστικό πλέγμα θα αποτελείται από εξαεδρικά στοιχεία και όπου αυτό κρίνεται απαραίτητο από σφηνοειδή στοιχεία (σαν τμήματα από κομμένη πίττα).
<i>Tet/Hybrid</i>	Ο όγκος στον οποίο θα κατασκευάσουμε υπολογιστικό πλέγμα θα αποτελείται από τετραεδρικά στοιχεία αλλά όπου κρίνεται απαραίτητο θα συμπεριλαμβάνονται και εξαεδρικά, πυραμιδοειδή και σφηνοειδή στοιχεία .

Πίνακας 3.4. Περιγραφή των στοιχείων που χρησιμοποιούνται για την κατασκευή υπολογιστικού πλέγματος σε όγκο.

Επιπλέον ένα άλλο σημαντικό στοιχείο, είναι η επιλογή του τύπου του υπολογιστικού πλέγματος. Το Gambit δίνει τις ακόλουθες επιλογές, οι οποίες παρατίθενται στον Πιν. 3.5 :

<i>Επιλογή Τύπου Υ.Π. (Type)</i>	<i>Περιγραφή</i>
<i>Map</i>	Δημιουργία ενός δομημένου, υπολογιστικού πλέγματος από εξαεδρικά στοιχεία
<i>Submap</i>	Πραγματοποιείται διαίρεση ενός μη διακριτοποιημένου όγκου σε διακριτές περιοχές και δημιουργείται ένα δομημένο υπολογιστικό πλέγμα από εξαεδρικά στοιχεία σε κάθε μία από τις διακριτές περιοχές.
<i>Tet Primitive</i>	Πραγματοποιείται διαίρεση ενός τετραεδρικού όγκου σε τέσσερις εξαεδρικές περιοχές και δημιουργείται δομημένο υπολογιστικό πλέγμα σε κάθε μια από τις από τις περιοχές.
<i>T Grid</i>	Δημιουργία υπολογιστικού πλέγματος το οποίο αποτελείται κυρίως από τετραεδρικά στοιχεία, τα οποία ωστόσο είναι δυνατόν να περιέχουν εξαεδρικά, πυραμιδοειδή και σφηνοειδή στοιχεία εντός του όγκου τους.
<i>Stairstep</i>	Δημιουργία ενός κανονικού εξαεδρικού υπολογιστικού πλέγματος.
<i>Hex Core</i>	Δημιουργία ενός πυρήνα από εξαεδρικά στοιχεία τα οποία περιβάλλονται περιφερειακά από τετραεδρικά, πυραμιδοειδή και σφηνοειδή στοιχεία.

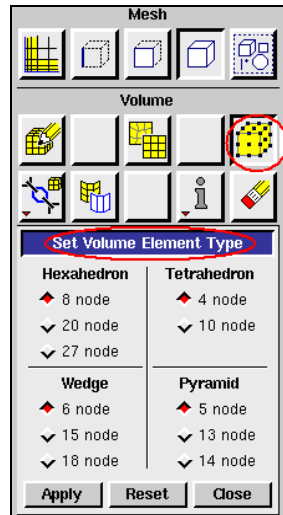
Πίνακας 3.5. Περιγραφή των τύπων των υπολογιστικών πλεγμάτων σε επιφάνεια

Οι δυνατοί συνδυασμοί για το είδος του στοιχείου που θα χρησιμοποιηθεί και το είδος του υπολογιστικού πλέγματος φαίνονται παρακάτω Πιν. 3.6 :

<i>Type Option</i>	<i>Elements Option</i>		
	Hex	Hex/Wedge	Tet/Hybrid
Map	×		
Submap	×		
Tet Primitive	×		
Cooper	×	×	
TGrid			×
Stairstep	×		
Hex Core			×

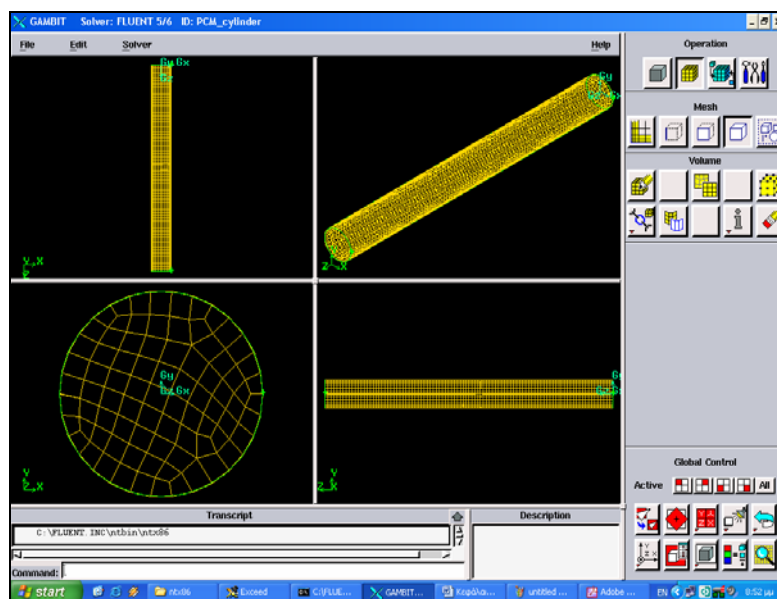
Πίνακας 3.6. Δυνατοί συνδυασμοί, είδους στοιχείου και τύπου υπολογιστικού πλέγματος σε όγκο

Μια άλλη παράμετρος που είναι εξίσου σημαντική είναι η επιλογή τύπου στοιχείων. Η παράμετρος καθορίζει τον αριθμό των κόμβων σε κάθε είδος στοιχείο που χρησιμοποιούμε, είτε αυτό είναι εξάεδρο, τετράεδρο, σφηνοειδές ή πυραμιδοειδές. Η μορφή που αναμένεται να παρατηρήσουμε στο πρόγραμμα παρουσιάζεται στο σχ. 3.12.



Σχήμα 3.12. Επιλογή κόμβων ανά στοιχείο, εξάεδρο, τετράεδρο, σφηνοειδές ή πυραμιδοειδές.

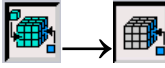
Η δομή του υπολογιστικού πλέγματος για τις επιφάνειες και τον όγκο της γεωμετρίας του κυλίνδρου φαίνεται στο ακόλουθο σχήμα, σχ.3.13, για την κατασκευή του υπολογιστικού πλέγματος επιλέξαμε τον όγκο ελέγχου του κυλίνδρου κατόπιν σαν τύπο στοιχείου επιλέξαμε **Hex/Wedge** και σαν τύπο υπολογιστικού πλέγματος Cooreg το οποίο ενδύκνεται για κυλινδρικές γεωμετρίες. Επιπλέον για την διαμέριση του πλέγματος επιλέγουμε **Interval Count 25**, δηλαδή διαμερισμός του σε 25 τμήματα.




Σχήμα 3.13. Υπολογιστικό πλέγμα στις επιφάνειες και τον όγκο του κυλίνδρου.

3.5 Προσδιορισμός ζωνών και ορίων στο γεωμετρικό μοντέλο

Ο προσδιορισμός των ζωνών και των ορίων είναι απαραίτητος διότι ουσιαστικά οριοθετεί το γεωμετρικό μοντέλο που έχουμε κατασκευάσει, το Gambit δίνει τις ακόλουθες δύο δυνατότητες :

- Οριακές ζώνες (*specify boundary types*) : καθορίζονται οι οριακές συνθήκες του μοντέλου και το είδος των ορίων.  (1)

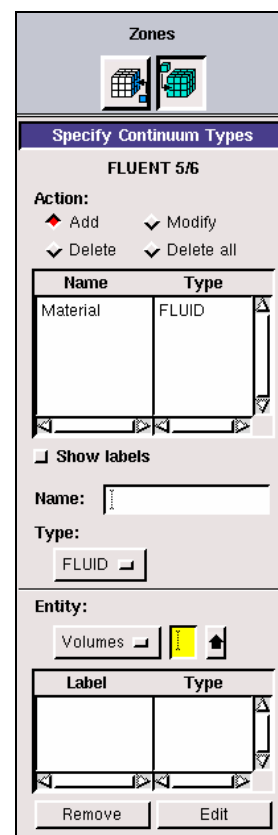
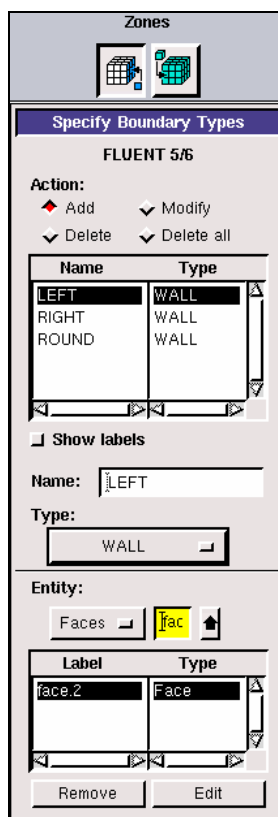
- Οι ζώνες συνεχούς μέσου (*specify continuum types*) : καθορίζονται τα χαρακτηριστικά των ορίων και το είδος του διακινούμενου μέσου στη γεωμετρία μας.  (2)

(1) Επιλογή οριακής ζώνης :

Αρχικά επιλέγουμε τις επιφάνειες στις οποίες θέλουμε να τοποθετήσουμε τις οριακές συνθήκες. Αυτές είναι οι δύο κάθετες επιφάνειες και οι πλευρές, στις οποίες δίνουμε χαρακτηριστικά στερεών τοιχωμάτων (σχ. 3.14) .

(2) Επιλογή διακινούμενου μέσου :

Το διακινούμενο ρευστό εντός του κυλίνδρου είναι υλικό αλλαγής φάσης το οποίο θα είναι υπο θέρμανση, συνεπώς θα είναι σε υγρή κατάσταση. Άρα ο όγκος θα αποτελείται εσωτερικά από ρευστό (σχ. 3.15)



Κεφάλαιο 4^ο

Εισαγωγή στο υπολογιστικό πακέτο Fluent

4.1 Εισαγωγή

Το υπολογιστικό πακέτο Fluent, είναι ένα λογισμικό, στο οποίο ο μελέτης χρησιμοποιεί αριθμητικές μεθόδους για την επίλυση φαινομένων μετάδοσης θερμότητας, ροής και στερεοποίησης και τήξης. Η χρήση του λογισμικού απαιτεί την ύπαρξη ενός σχεδιαστικού πακέτου, εν προκειμένω το Gambit, από το οποίο κατασκευάζεται το γεωμετρικό μοντέλο και το υπολογιστικό πλέγμα τα οποία στην συνέχεια εισάγονται σαν δεδομένα στο Fluent και γίνονται οι απαραίτητοι υπολογισμοί.

Το υπολογιστικό πακέτο Fluent, μπορεί να επιλύσει φαινόμενα τα οποία εξελίσσονται σε 2 ή 3 διαστάσεις. Το αντικείμενο της διπλωματικής εργασίας η προσομοίωση ενός σωλήνα μηδενικού πάχους (κύλινδρος) , στον οποίο εμπεριέχεται ένα υλικό αλλαγής φάσης. Επομένως το φαινόμενο είναι τρισδιάστατο και ο στόχος της χρησιμοποίησης του Fluent είναι να ελέγξουμε αρχικά το υπολογιστικό πλέγμα που κατασκευάσαμε στο Gambit, για πιθανές ατέλειες και κατόπιν να αντιμετωπίσουμε το φαινόμενο της στερεοποίησης και τήξης του υλικού αλλαγής φάσης (*melting & solidification*). Στόχος της διπλωματικής εργασίας είναι ο προσδιορισμός της θέσης της διεπιφάνειας αλλαγής φάσης με καθορισμένες οριακές συνθήκες που θα αναφερθούν αναλυτικά παρακάτω.

Στις παραγράφους που ακολουθούν δίνεται μια εποπτική άποψη για τη χρήση του προγράμματος και περιγράφονται αναλυτικά τα βήματα που πραγματοποιήθηκαν για την επίλυση του φαινομένου της τήξης και στερεοποίησης του υλικού αλλαγής φάσης στο εσωτερικό του κυλίνδρου. Οι βασικές λειτουργίες (*operations*) του προγράμματος οι οποίες θα αναλυθούν είναι οι εξής :

- Εντολές που αφορούν την εισαγωγή του αρχείου από το σχεδιαστικό στο υπολογιστικό πακέτο.
- Εντολές που αφορούν το υπολογιστικό πλέγμα το οποίο κατασκευάστηκε στο σχεδιαστικό πακέτο και πλέον χρησιμοποιείται για τον υπολογισμό χαρακτηριστικών μεγεθών, π.χ. : θερμοκρασία κατά μήκος του σωλήνα.
- Εντολές που αφορούν τις οριακές συνθήκες, τις φυσικοχημικές ιδιότητες τόσο του υλικού αλλαγής φάσης όσο και του υλικού του κυλίνδρου. Σε αυτή την ενότητα επιπλέον ορίζονται και οι εξισώσεις που διέπουν το φαινόμενο της τήξης & στερεοποίησης.
- Εντολές που αφορούν την αριθμητική επίλυση του προβλήματος και επίσης γίνεται ο προσδιορισμός του χρονικού και χωρικού βήματος κάτω από το οποίο θα πραγματοποιηθεί η επαναληπτική διαδικασία για τη σύγκλιση της λύσης.

- Εντολές που αφορούν την απεικόνιση των αποτελεσμάτων σε περιβάλλον με γραφικά καθώς και επίσης απεικόνιση των αποτελεσμάτων σε γραφικές παραστάσεις.

Η ανάλυση κάθε φαινομένου απαιτεί ειδικές γνώσεις για τη μοντελοποίηση της και την αριθμητική επίλυση των σχετικών προς το φαινόμενο διαφορικών εξισώσεων. Το κείμενο που ακολουθεί είναι μια εισαγωγή στις βασικές λειτουργίες του Fluent, και γίνεται εκτενής αναφορά στη μοντελοποίηση και επίλυση φαινομένων στερεοποίησης και τήξης. Η αναφορά σε φαινόμενα μεταφοράς ή ροής ρευστών δεν αφορά την παρούσα διπλωματική εργασία και παραλείπεται.

4.2 Διαδικασία αντιμετώπισης και επίλυσης προβλημάτων στο Fluent

Σε αυτή την παράγραφο αναφέρονται τα βασικά βήματα τα οποία θα μας οδηγήσουν στην επίλυση του προβλήματος που επιθυμούμε. Η αναλυτική προσέγγιση για τον τρόπο εισαγωγής και επεξεργασίας των δεδομένων γίνεται στις επόμενες παραγράφους, ο αλγόριθμος που ακολουθείται είναι ο ακόλουθος :

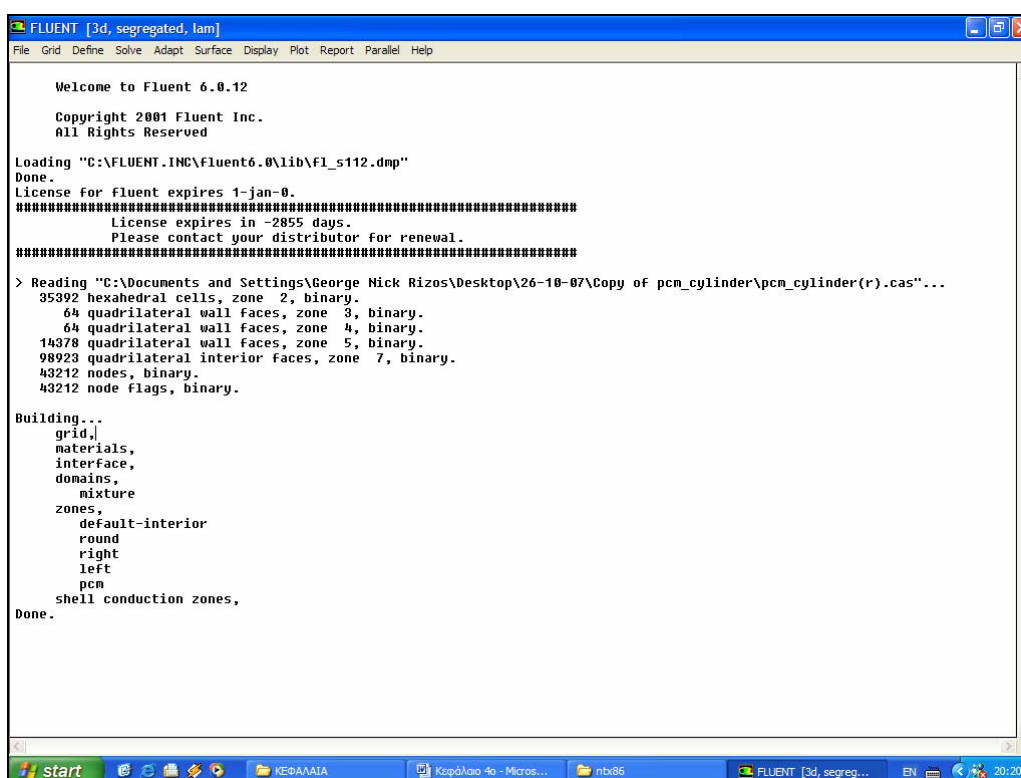
1. Σχεδιασμός του γεωμετρικού μοντέλου και του υπολογιστικού πλέγματος σε οποιοδήποτε σχεδιαστικό πακέτο που είναι συμβατό με το Fluent, για παράδειγμα το **Gambit**.
2. Κατά την έναρξη του Fluent, μας ζητείται να επιλέξουμε σε πόσες διαστάσεις εξελίσσεται το φαινόμενο μας (**2-D, 3-D**) και επιπλέον αν θέλουμε απλής ή διπλής ακρίβειας αποτελέσματα (**2-ddp, 3-ddp**).
3. Κατόπιν γίνεται η εισαγωγή του γεωμετρικού μοντέλου και του υπολογιστικού πλέγματος στο Fluent, το αρχείο το οποίο αναγνωρίζει το Fluent έχει την κατάληξη **.msh**. Η διαδικασία που ακολουθείται είναι η εξής : **File** → **Read** → **Case... / Data ... / Case & Data ...**
4. Επιθυμητό θα ήταν να γίνει ένας έλεγχος του υπολογιστικού πλέγματος που κατασκευάστηκε στο Gambit, προκειμένου να αποφευχθούν πιθανά σφάλματα. Η διαδικασία είναι : **Grid** → **Check ...**
5. Γίνεται η επιλογή της αριθμητικής μεθόδου επίλυσης του φαινομένου και ο ορισμός αν το φαινόμενο είναι μόνιμο ή μη. Η διαδικασία που ακολουθείται είναι : **Define** → **Models** → **Solver...**
6. Παράλληλα γίνεται η επιλογή του φαινομένου που θα ασχοληθούμε, ώστε να χρησιμοποιηθούν οι κατάλληλες διαφορικές εξισώσεις. Η διαδικασία που ακολουθείται είναι η εξής : **Define** → **Models** → **Solidification & Melting...**
7. Πραγματοποιείται ο προσδιορισμός του μέσου ή του υλικού που επεξεργαζόμαστε στο πείραμα μας. Η διαδικασία που ακολουθείται είναι η εξής : **Define** → **Materials...**
8. Γίνεται ορισμός των οριακών συνθηκών του προβλήματος. Η διαδικασία που ακολουθείται είναι η εξής : **Define** → **Boundary conditions...**
9. Έναρξη της διαδικασίας επίλυσης του προβλήματος, επιλέγοντας κατάλληλους συντελεστές υποχαλάρωσης. Η διαδικασία που ακολουθείται είναι η εξής : **Solve** → **Controls** → **Solution...**
10. Ακολουθεί ο ορισμός μιας αρχικής τιμής για την έναρξη των επαναλήψεων, με σκοπό τη σύγκλιση της επαναληπτικής μεθόδου. Η διαδικασία που ακολουθείται είναι η εξής : **Solve** → **Initialize...**
11. Στη συνέχεια επιλέγουμε κατάλληλα κριτήρια σύγκλισης για τις εξαρτημένες μεταβλητές των διαφορικών εξισώσεων. Η διαδικασία που ακολουθείται είναι η εξής : **Solve** → **Monitors** → **Residuals...**

12. Έχοντας δώσει αρχικές τιμές γίνεται εκκίνηση της επίλυσης με ορισμό των παραμέτρων για χρονικό βήμα μεταξύ των επαναλήψεων. Η διαδικασία που ακολουθείται είναι η εξής : **Solve** → **Iterate...**
13. Πραγματοποιείται γραφική απεικόνιση των αποτελεσμάτων σε γραφήματα ή σε περιβάλλον γραφικών. Η διαδικασία που ακολουθείται είναι η εξής :
Plot → **xy plot...**
14. Ένα από τα πιο σημαντικά βήματα είναι η κριτική ικανότητα του μελετητή ώστε να αντιλαμβάνεται αν τα αποτελέσματα που υπολογίστηκαν είναι ορθά ή όχι.
15. Αν τελικά τα αποτελέσματα που εξήχθησαν κρίθηκαν αποδεκτά τότε προχωράμε σε αποθήκευση των δεδομένων και των αποτελεσμάτων που λάβαμε. Η διαδικασία που ακολουθείται είναι η εξής :
File → **Write** → **Case...** / **Data ...** / **Case & Data ...**

4.3 Επιφάνεια εργασίας Fluent

4.3.1 Εντολές για την εισαγωγή και αποθήκευση αρχείων στο Fluent (File...)

Η αρχική εικόνα που παρουσιάζεται κατά τη έναρξη του προγράμματος είναι η επιφάνεια εργασίας. Στην επιφάνεια εργασίας βρίσκονται το σύνολο των εντολών που απαιτούνται για τον έλεγχο του υπολογιστικού πλέγματος, τον προσδιορισμό οριακών συνθηκών, την αριθμητική επίλυση του φαινομένου και την απεικόνιση των αποτελεσμάτων σε γραφήματα. Στο σχ. 4.1 φαίνεται η επιφάνεια εργασίας του Fluent, όπου έχουμε « φορτώσει » το αρχείο που κατασκευάστηκε για τον κύλινδρο στο υπολογιστικό πακέτο Gambit.



```
FLUENT [3d, segregated, lam]
File Grid Define Solve Adapt Surface Display Plot Report Parallel Help

Welcome to Fluent 6.0.12

Copyright 2001 Fluent Inc.
All Rights Reserved

Loading "C:\FLUENT.INC\Fluent6.0\lib\fl_s112.dmp"
Done.
License for fluent expires 1-jan-0.
#####
License expires in -2855 days.
Please contact your distributor for renewal.
#####
> Reading "C:\Documents and Settings\George Nick Rizos\Desktop\26-10-07\Copy of pcm_cylinder\pcm_cylinder(r).cas"...
35392 hexahedral cells, zone 2, binary.
64 quadrilateral wall faces, zone 3, binary.
64 quadrilateral wall faces, zone 4, binary.
14378 quadrilateral wall faces, zone 5, binary.
98923 quadrilateral interior faces, zone 7, binary.
43212 nodes, binary.
43212 node flags, binary.

Building...
grid,
materials,
interface,
domains,
mixture
zones,
default-interior
round
right
left
pcm
shell conduction zones,
Done.
```

Σχήμα 4.1. Επιφάνεια εργασίας Fluent.

Κατά την κατασκευή του γεωμετρικού μοντέλου στο Gambit, όταν γίνεται η αποθήκευση των δεδομένων δημιουργείται ένα αρχείο με την κατάληξη *.msh*. Το αρχείο αυτό χρησιμοποιείται από το Fluent για την εισαγωγή των γεωμετρικών δεδομένων και των στοιχείων του υπολογιστικού πλέγματος στο Fluent. Επομένως για την πραγματοποίηση του ανοίγματος του αρχείου ακολουθούμε την πορεία :

- File* → *Read* → *Case...* : Αν πρόκειται να φορτώσουμε μόνο το αρχείο *.msh*, που έχουμε κατασκευάσει στο σχεδιαστικό πακέτο.
- *Data...* : Αν πρόκειται να φορτώσουμε ένα αρχείο το οποίο έχουμε κατασκευάσει στο Fluent και περιέχει δεδομένα μόνο.
- *Case and Data...* : Αν πρόκειται να φορτώσουμε ένα αρχείο το οποίο έχουμε κατασκευάσει στο Fluent και περιέχει δεδομένα και αποτελέσματα.

Για την αποθήκευση των εργασιών που πραγματοποιήθηκαν στο Fluent, χρησιμοποιούμε την εντολή *Write*, στην οποία υπάρχουν οι αντίστοιχες επιλογές όπως και στην εντολή *Read*, δηλαδή : *Case*, *Data*, *Case & Data*, ανάλογα με τι στοιχεία θέλουμε να αποθηκεύσουμε στο αρχείο μας. Μετά από την αποθήκευση δημιουργείται ένα νέο αρχείο το οποίο έχει την κατάληξη *.cas* και αυτό το αρχείο πλέον περιέχει όλες τις απαραίτητες πληροφορίες που απαιτούνται για την αριθμητική επίλυση του υπό εξέταση φαινομένου.

4.3.2 Εντολές που αφορούν το υπολογιστικό πλέγμα (*Grid...*)

Η εντολή από την οποία πραγματοποιούνται αλλαγές σχετικά με το υπολογιστικό πλέγμα που κατασκευάστηκε στο σχεδιαστικό πακέτο Gambit, γίνονται μέσω της εντολής *Grid*.

Αρχικά κατά την εισαγωγή μιας γεωμετρίας με υπολογιστικό πλέγμα στο Fluent, απαιτείται να γίνεται έλεγχος του πλέγματος που κατασκευάστηκε στο σχεδιαστικό πακέτο για τυχόν ατέλειες. Η διαδικασία είναι η εξής :

Grid → *check...*

Η εικόνα που θα αντικρύσουμε στο πρόγραμμα παρουσιάζεται στο *σχ. 4.2*, όπου παρατηρούμε ότι αναγράφονται πληροφορίες για τη σχετική θέση και τις διαστάσεις της εισαχθείσας γεωμετρίας, υπολογισμός του εμβαδού και του όγκου των επιφανειών και του κυλίνδρου αντίστοιχα. Επιπλέον γίνεται μια σειρά από ελέγχους για την ορθότητα του υπολογιστικού πλέγματος.

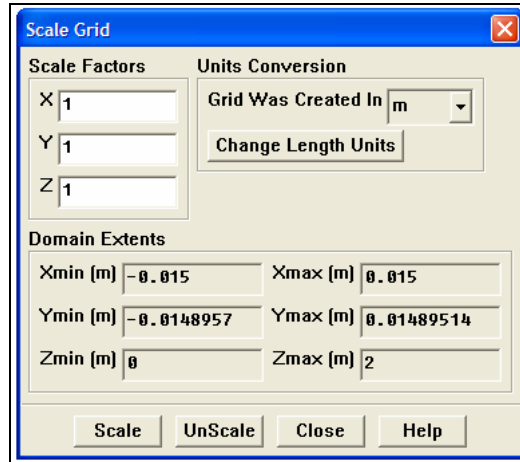
```
FLUENT [3d, segregated, lam]
File Grid Define Solve Adapt Surface Display Plot Report Parallel Help
All Rights Reserved
Loading "C:\FLUENT.INC\Fluent6.0\lib\F1_s112.dmp"
Done.
License for fluent expires 1-jan-0.
#####
License expires in -2855 days.
Please contact your distributor for renewal.
#####

Grid Check

Domain Extents:
x-coordinate: min (m) = -1.500000e-02, max (m) = 1.500000e-02
y-coordinate: min (m) = -1.489570e-02, max (m) = 1.489514e-02
z-coordinate: min (m) = 0.000000e+00, max (m) = 2.000000e+00
Volume statistics:
minimum volume (m3): 2.339543e-08
maximum volume (m3): 6.173735e-08
total volume (m3): 1.399994e-03
Face area statistics:
minimum face area (m2): 6.469559e-06
maximum face area (m2): 1.673951e-05
Checking number of nodes per cell.
Checking number of faces per cell.
Checking thread pointers.
Checking number of cells per face.
Checking face cells.
Checking bridge faces.
Checking right-handed cells.
Checking face handedness.
Checking element type consistency.
Checking boundary types:
Checking face pairs.
Checking periodic boundaries.
Checking node count.
Checking nosolve cell count.
Checking nosolve face count.
Checking face children.
Checking cell children.
Checking storage.
Done.
```

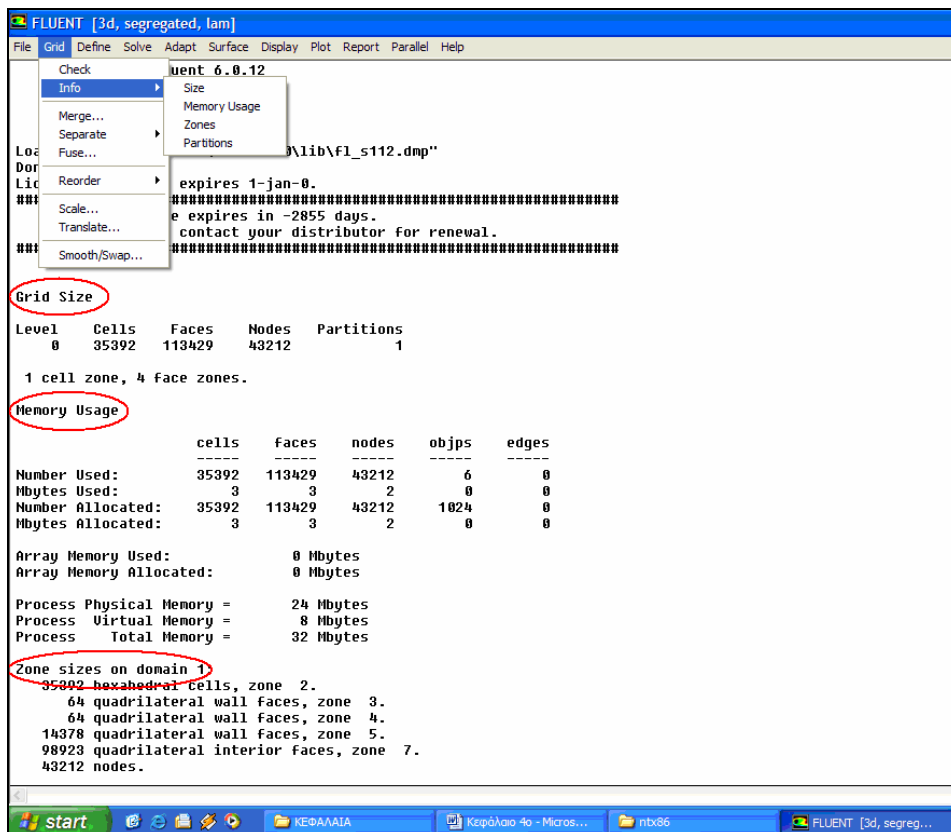
Σχήμα 4.2. Έλεγχος υπολογιστικού πλέγματος, γεωμετρικού μοντέλου

Μια σημαντική παράμετρος η οποία είναι απαραίτητη να ληφθεί υπόψη είναι η κλίμακα που χρησιμοποιείται στο υπολογιστικό πλέγμα. Στο σχ. 4.3, που ακολουθεί φαίνονται οι χωρικές μονάδες που χρησιμοποιούμε στο πλέγμα, η κλίμακα που χρησιμοποιείται στις 3 διαστάσεις x, y, z καθώς και οι οριακές διαστάσεις του γεωμετρικού μοντέλου.



Σχήμα 4.3. Επιλογή κλίμακας υπολογιστικού πλέγματος

Τέλος αναφέρουμε ότι μπορούμε να αντλήσουμε και άλλες πληροφορίες για το υπολογιστικό πλέγμα, όπως το μέγεθος, τη μνήμη που απαιτείται, τις διάφορες ζώνες και τμήματά του. Τα παραπάνω στοιχεία εμφανίζονται στο σχ. 4.4 που ακολουθεί.



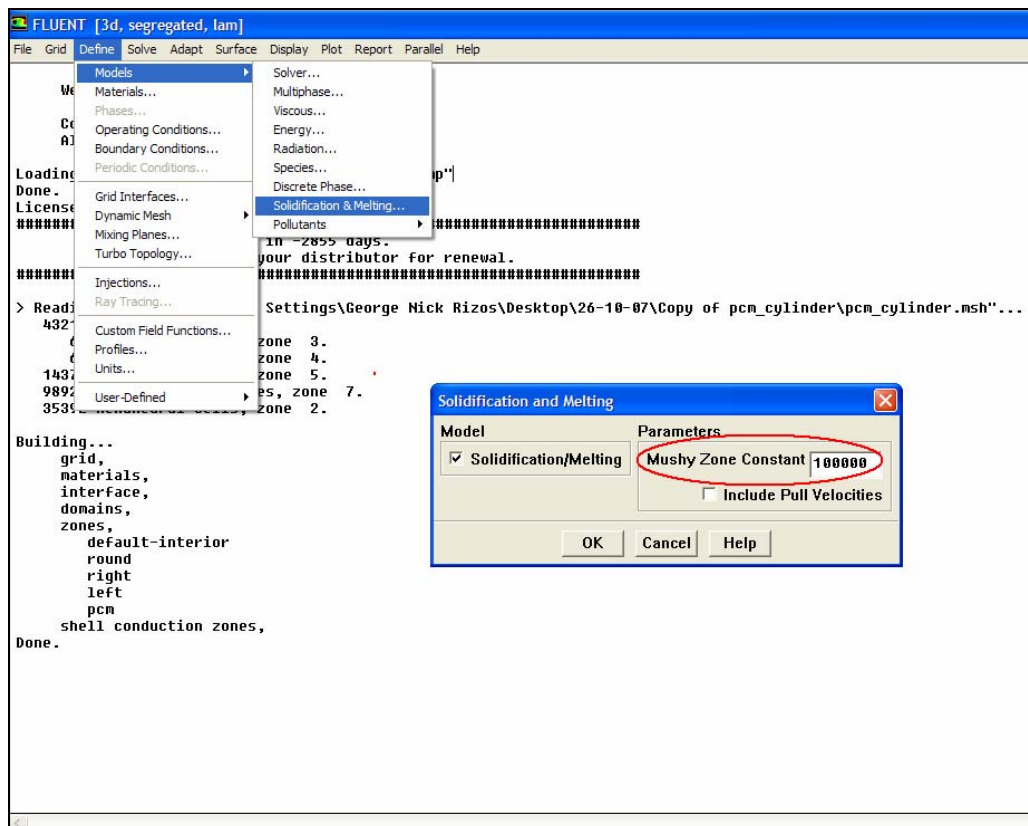
Σχήμα 4.4. Διάφορες πληροφορίες σχετικά με το υπολογιστικό πλέγμα

4.3.3 Εντολές που αφορούν τον προσδιορισμό της αριθμητικής μεθόδου επίλυσης του προβλήματος, οριακών συνθηκών και φυσικοχημικών ιδιοτήτων του υλικού (*Define ...*)

4.3.3.1 Εντολές που αφορούν τον προσδιορισμό της αριθμητικής μεθόδου επίλυσης του προβλήματος

Το Fluent χρησιμοποιείται για επίλυση φαινομένων στερεοποίησης και τήξης, τα οποία λαμβάνουν χώρα σε χαρακτηριστικές θερμοκρασίες (π.χ. : σε καθαρά μέταλλα) και σε εύρος θερμοκρασιών (π.χ. : σε διφασικά μίγματα). Η μέθοδος που εφαρμόζεται από το Fluent, αντί να εντοπίζει σε κάθε βήμα το μέτωπο στερεού – υγρού, είναι η μέθοδος της ενθαλπίας. Η τηγμένη ζώνη (*mushy zone*) στερεού – υγρού, συμπεριφέρεται σαν μια πορώδης ζώνη με πορώδες (*porosity*) ίσο προς το κλάσμα υγρού (*liquid fraction*).

Επομένως η μέθοδος της ενθαλπίας για την περιγραφή φαινομένων στερεοποίησης και τήξης επιλέγεται το πρόγραμμα με την πορεία που φαίνεται στο σχ. 4.5 που ακολουθεί. Κατά την επιλογή της μεθόδου, εμφανίζεται η σταθερά τηγμένης ζώνης (*Mushy Zone Constant : A_{mush}*) η οποία είναι αυτή η περιοχή στην οποία η θερμοκρασία είναι μεταξύ υγρής και στερεής φάσης. Όσο μεγαλύτερη είναι η τιμή της A_{mush} , τόσο πιο απότομη είναι μετάβαση της ταχύτητας του υλικού σε στερεά φάση. Οι προτεινόμενες τιμές για την $A_{mush} = (10^4, 10^7)$. Τέλος αναφέρουμε οτι πολύ μεγάλες τιμές της A_{mush} , επηρεάζουν το τελικό αποτέλεσμα και η μέθοδος δεν συγκλίνει.



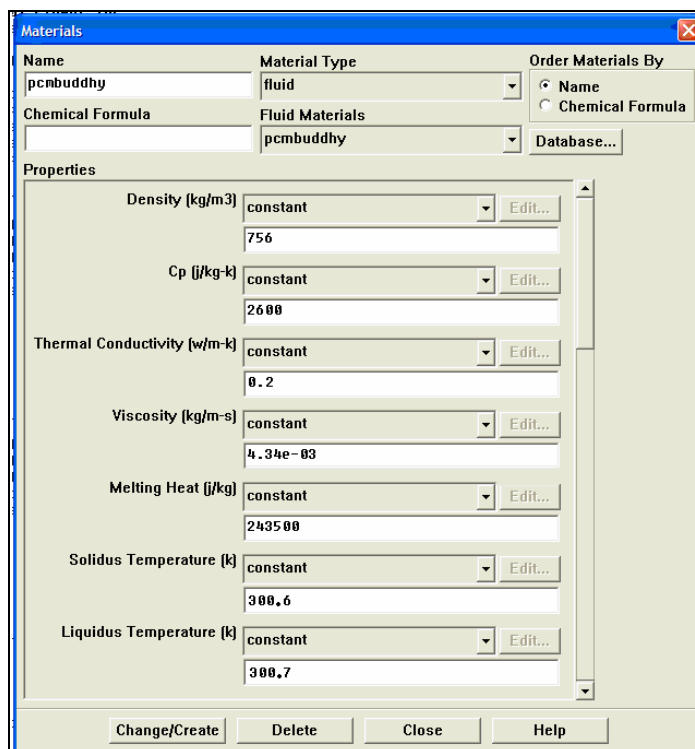
Σχήμα 4.5. Πορεία μεθόδου ενθαλπίας σε φαινόμενα στερεοποίησης και τήξης

4.3.3.2 Εντολές που αφορούν τον προσδιορισμό φυσικοχημικών ιδιοτήτων του υλικού (*p.c.m.*)

Το μενού του Fluent μας δίνει την επιλογή να επιλέξουμε διάφορα είδη υλικών τα οποία έχει αποθηκευμένα σε βάση δεδομένων όσο και στη δημιουργία νέων υλικών που χρειαζόμαστε στις εφαρμογές μας. Στο σχ. 4.6, παρουσιάζεται η πορεία για τη δημιουργία νέου υλικού, εν προκειμένω το υλικό αλλαγής φάσης ονομάζεται « *pcmbuddhy* » και οι φυσικοχημικές ιδιότητες του παρουσιάζονται στον Πίν. 4.1 που ακολουθεί.

Φυσικοχημικές Ιδιότητες Υλικού Αλλαγής Φάσης « <i>p.c.m.buddhy</i> »	
ρ Πυκνότητα (kg/m^3)	756
C_p Θερμοχωρητικότητα ($\text{J/kg}\cdot\text{K}$)	2600
k Θερμική αγωγιμότητα ($\text{W/m}\cdot\text{K}$)	0.2
μ Δυναμικό ιξώδες ($\text{kg/m}\cdot\text{s}$)	$4.34\cdot 10^{-3}$
Q_L (m) Λανθάνουσα θερμότητα τήξης (KJ/kg)	243.5
T_L Θερμοκρασία έναρξης τήξης (K)	300.6
T_S Θερμοκρασία έναρξης στερεοποίησης (K)	300.7

Πίνακας 4.1. Φυσικοχημικές ιδιότητες υλικού αλλαγής φάσης



Σχήμα 4.6. Φυσικοχημικές ιδιότητες υλικού αλλαγής φάσης

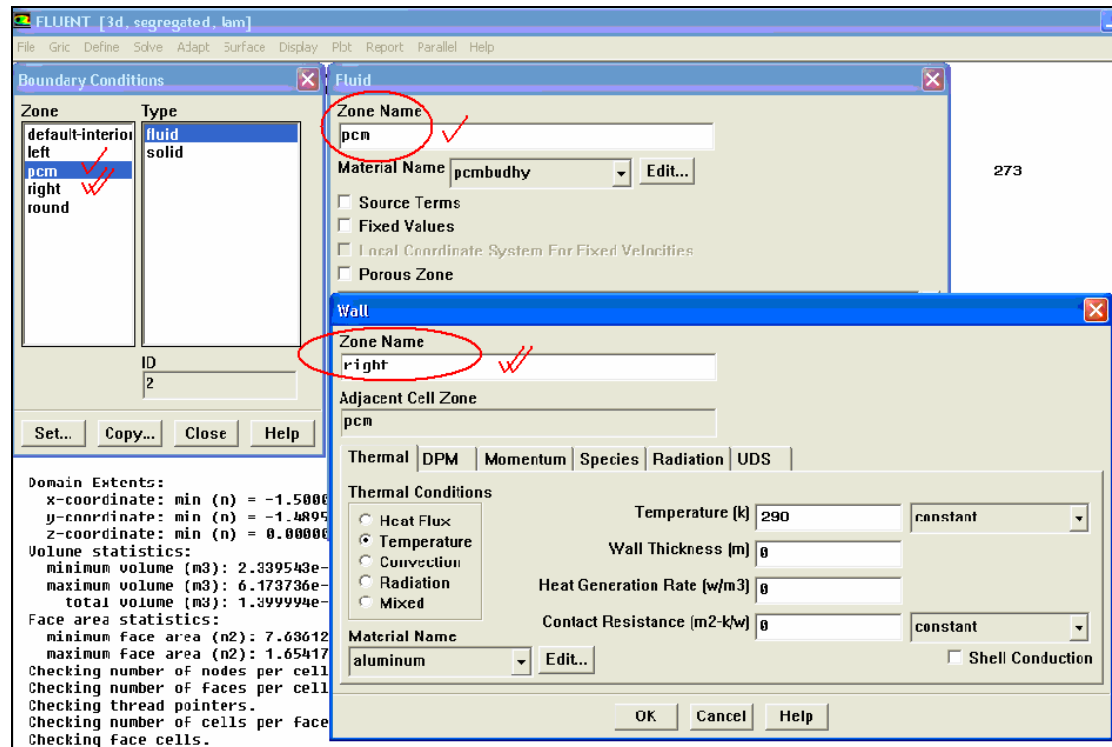
4.3.3.3 Εντολές που αφορούν τον προσδιορισμό οριακών συνθηκών στη γεωμετρία

Το μενού του Fluent δίνει τη δυνατότητα να ορίσουμε οριακές συνθήκες στις επιφάνειες της γεωμετρίας που έχουμε κατασκευάσει. Συγκεκριμένα ο κύλινδρος είναι μια απλή γεωμετρία η οποία αποτελείται από 2 επιφάνειες (βάσης και κορυφής, οι οποίες στο Fluent έχουν κωδικοποιηθεί ως *left* και *right* αντίστοιχα), μια περιφερειακή επιφάνεια η οποία χαρακτηρίζεται ως *round* και φυσικά το εμπεριεχόμενο στον κύλινδρο υλικό αλλαγής φάσης, κωδικοποιημένο ως *pcm*. Οι ιδιότητες για κάθε μια από τις παραπάνω παραμέτρους φαίνονται συγκεντρωτικά στον Πιν. 4.2 που ακολουθεί. Η πορεία που ακολουθούμε προκειμένου να ορίσουμε οριακές συνθήκες φαίνεται στο σχ. 4.7, και συνοπτικά είναι :

Define → Boundary conditions ...

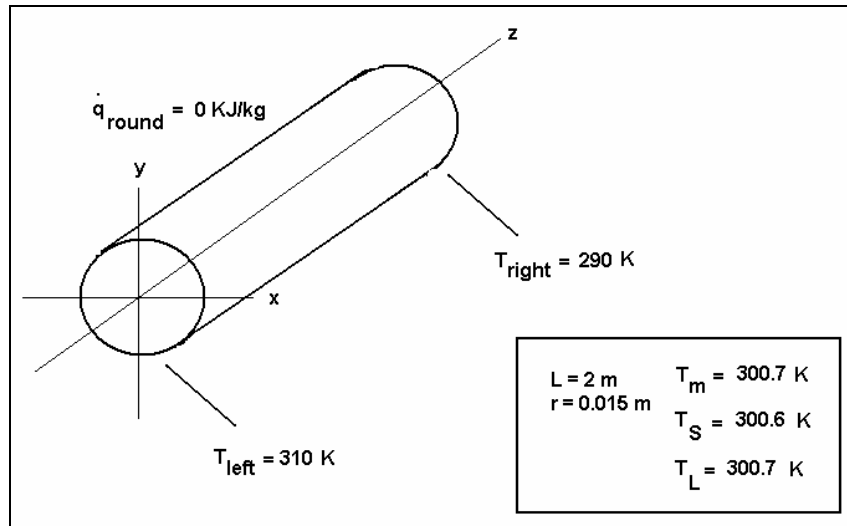
Τμήμα της γεωμετρίας	Είδος υλικού	Χαρακτηριστική ιδιότητα (Οριακή συνθήκη)
Επιφάνεια βάσης (<i>left</i>)	Wall	$T_{left} = 310 \text{ K}$
Επιφάνεια κορυφής (<i>right</i>)	Wall	$T_{right} = 290 \text{ K}$
Περιφερειακή επιφάνεια (<i>round</i>)	Wall	$\dot{q} = 0 \text{ KJ / kg}$ (αδιαβατικό τοίχωμα)
Υλικό αλλαγής φάσης (<i>pcm</i>)	Fluid	Οι ιδιότητές του έχουν οριστεί στον Πίν. 1

Πίνακας 4.2. Οριακές συνθήκες των χαρακτηριστικών της γεωμετρίας.



Σχήμα 4.7. Οριακές συνθήκες στις επιφάνειες του γεωμετρικού μοντέλου

Στο σχ. 4.8 που ακολουθεί, παρουσιάζεται ένα σκαρίφημα του γεωμετρικού μοντέλου, στο οποίο φαίνονται συγκεντρωτικά οι οριακές συνθήκες του προβλήματος στις επιφάνειες του μοντέλου καθώς επίσης τα γεωμετρικά χαρακτηριστικά του μοντέλου και οι κρίσιμες θερμοκρασίες του υλικού αλλαγής φάσης.



Σχήμα 4.8. Σκαρίφημα γεωμετρικού μοντέλου με τις οριακές συνθήκες

4.3.4 Εντολές που αφορούν την εφαρμογή της αριθμητικής επίλυσης του προβλήματος (Solve...)

4.3.4.1 Εντολές που αφορούν την επαναληπτική διαδικασία που θα ακολουθηθεί για την εφαρμογή της αριθμητικής μεθόδου

Το Fluent, για επίλυση του φαινομένου, χρησιμοποιεί κάποια αρχική τιμή ώστε να ξεκινήσει η επαναληπτική διαδικασία, ορισμένες φορές, κυρίως σε μη γραμμικά προβλήματα, για να αποφευχθεί η απόκλιση της τελικής λύσης, εφαρμόζεται η τεχνική της υποχαλάρωσης.

Η αιτία της ύπαρξης της μεθόδου έγκειται στο γεγονός ότι είναι αναγκαίο να παρακολουθούμε την εξέλιξη της εξαρτημένης μεταβλητής που θέλουμε να υπολογίσουμε. Στην περίπτωση μας είναι η θερμοκρασία T_a , για τη γενική περίπτωση έστω η εξαρτημένη μεταβλητή Φ . Το σκεπτικό της μεθόδου είναι να μειώνουμε από επανάληψη σε επανάληψη την τιμή της θερμοκρασίας που υπολογίζεται, θεωρώντας έναν σταθερό συντελεστή μείωσης, δηλαδή τον « συντελεστή υποχαλάρωσης, a » (*under-relaxation factor*). Η παραπάνω πρόταση γενικεύεται με μαθηματικούς όρους ως εξής :

$$\Phi = \Phi_{old} + a \cdot \Delta\Phi \Leftrightarrow$$

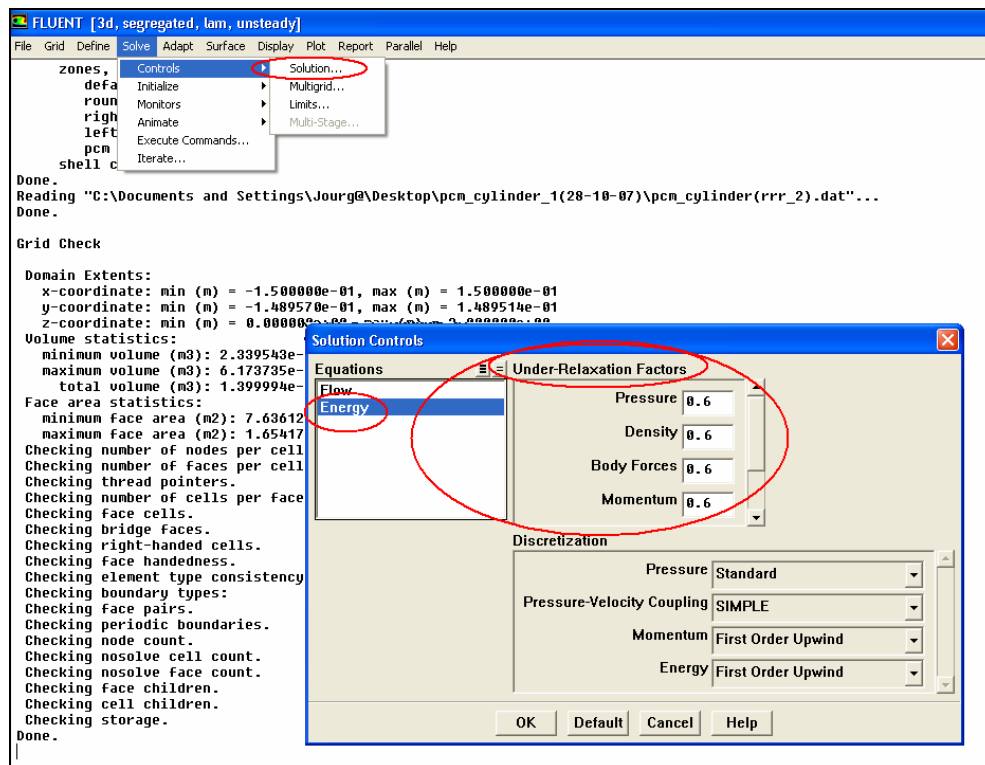
$$\Phi_{i+1} = \Phi_i + a \cdot \Delta\Phi$$

Όπου : (i) : είναι η προηγούμενη επανάληψη
(i+1) : η επόμενη επανάληψη

Όπως έχει προαναφερθεί τα φαινόμενα τήξης και στερεοποίησης πρέπει να αντιμετωπίζονται στο Fluent, σαν «διαχωρισμένα» (*Segregated*) και επιπλέον το φαινόμενο είναι μη μόνιμο, δηλαδή εξελίσσεται στο χρονικό πεδίο (*Time Unsteady*). Ο συντελεστής υποχαλάρωσης λαμβάνει τιμές : $0 < \alpha < 1$, και η τιμή του εξαρτάται από πολλούς παράγοντες. Σε γενικές γραμμές δεν υπάρχουν κανόνες για τον προσδιορισμό του και συνήθως εκλέγεται κατόπιν δοκιμών σε κάθε πρόβλημα. Ανάλογα με την εξέλιξη του φαινομένου, δηλαδή αν συγκλίνει η αποκλίνει η μέθοδος, επιλέγουμε τις τιμές του, αν παρατηρείται απόκλιση μειώνουμε τους συντελεστές υποχαλάρωσης και επανελέγχουμε τα αποτελέσματα.

Από βιβλιογραφικές πηγές οι προτεινόμενες τιμές για τους συντελεστές υποχαλάρωσης, φαινομένων τήξης και στερεοποίησης, για την εξίσωση της ενέργειας, κυμαίνονται στα πλαίσια του 0.6 – 0.7, και προτείνεται να μην επιλέγεται ιδιαίτερα μεγάλος αριθμός στη σταθερά ζώνης τήξης διότι παρουσιάζονται δυσκολίες κατά τη σύγκλιση της μεθόδου.

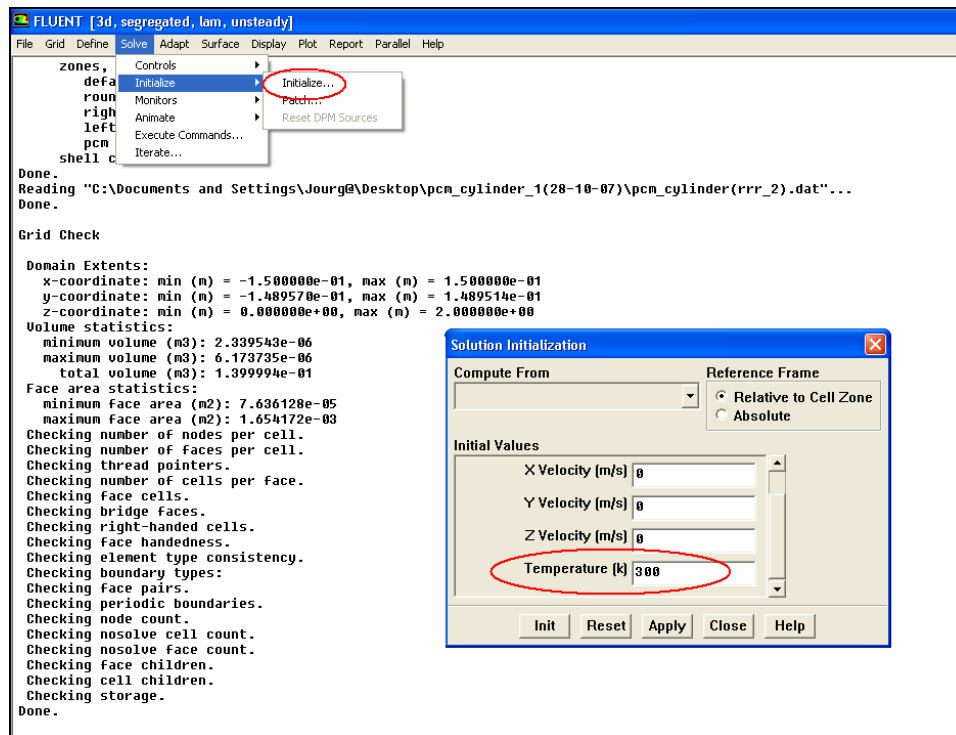
Στο σχ. 4.9 που ακολουθεί, παρουσιάζεται οι εξισώσεις ροής και ενέργειας και οι συντελεστές υποχαλάρωσης για διάφορα μεγέθη. Οι τιμές που εκλέχθηκαν κυμαίνονται από 0.6 – 07, σύμφωνα με τη βιβλιογραφία.



Σχήμα 4.9. Ορισμός συντελεστών υποχαλάρωσης στην εξίσωση της ενέργειας

4.3.4.2 Εντολές που αφορούν την έναρξη της επαναληπτικής διαδικασίας με αρχικές τιμές

Το Fluent, για επίλυση του φαινομένου, χρησιμοποιεί κάποια αρχική τιμή ώστε να ξεκινήσει η επαναληπτική διαδικασία, η πορεία για τον ορισμό της αρχικής τιμής φαίνεται παρακάτω. Ωστόσο αναφέρουμε ότι όσο πλησιέστερα είναι η τιμή που θέτουμε ως αρχική, στο εύρος τιμών που έχουμε ορίσει από πριν τόσο επιταχύνεται η διαδικασία επίλυσης του προβλήματος. Στο σχ. 4.10, που ακολουθεί παρουσιάζεται η πορεία εργασίας για τον προσδιορισμό αρχικών τιμών, στη συγκεκριμένη περίπτωση εμείς ορίζουμε σαν αρχική τιμή θερμοκρασίας τους $T = 300\text{ K}$.



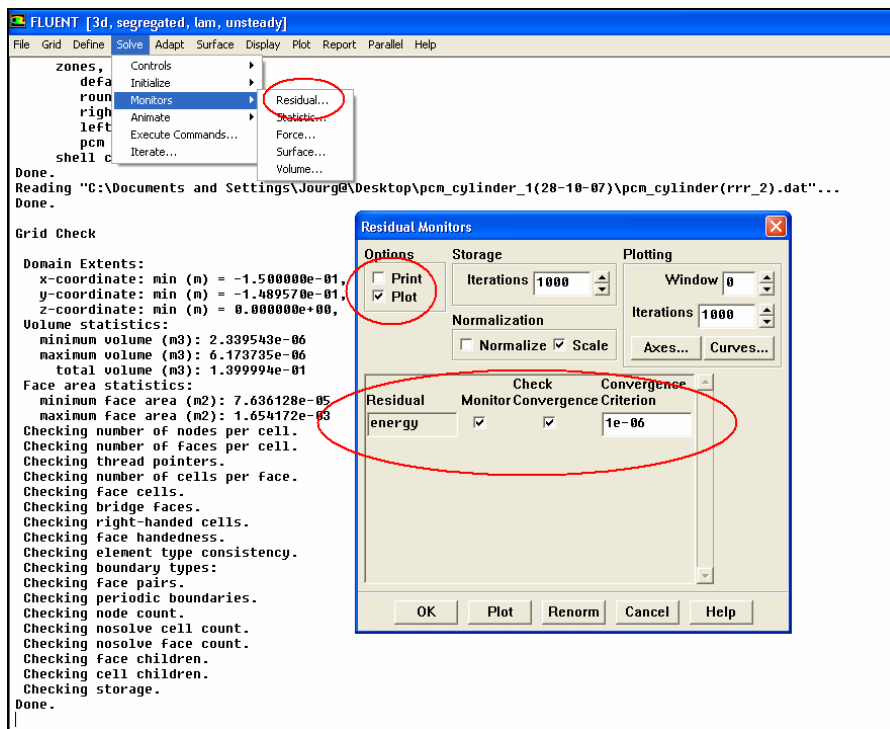
Σχήμα 4.10. Ορισμός αρχικής τιμής θερμοκρασίας για την εκκίνηση της επαναληπτικής διαδικασίας

4.3.4.3 Εντολές που αφορούν κριτήρια σύγκλισης για την προσέγγιση της αριθμητικής λύσης και σταθμικά υπόλοιπα

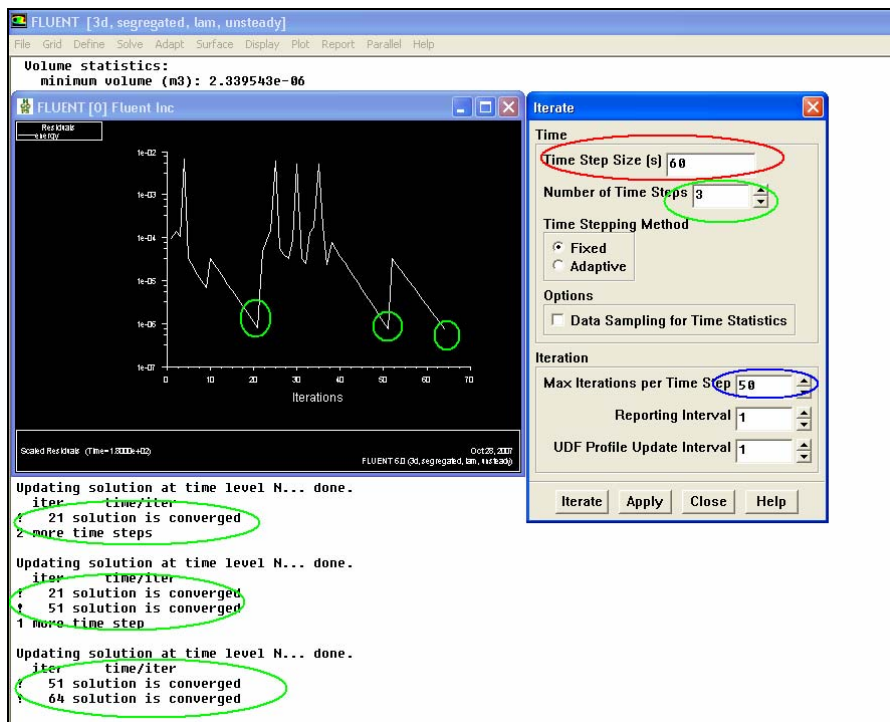
Οι διαφορικές εξισώσεις οι οποίες επιλύονται στο Fluent, επιλύονται αριθμητικά και οι λύσεις προκύπτουν από επαναληπτικές διαδικασίες, συνεπώς κατά τη διάρκεια των υπολογισμών και προκειμένου να επιτύχουμε σύγκλιση, απαιτείται να ορίσουμε ένα κριτήριο σύγκλισης, στο οποίο όταν φθάνουμε να θεωρείται ότι η αριθμητική λύση προσεγγίζει επαρκώς την αναλυτική λύση. Η εξίσωση της ενέργειας είναι ανάπτυγμα δυναμοσειράς v - όρων, κάποιοι από αυτούς τους όρους παραλείπονται και κατά αυτό τον τρόπο προκύπτει η αριθμητική λύση.

Τα σταθμικά υπόλοιπα απεικονίζονται στο Fluent γραφικά και παρουσιάζουν ταλαντωτική μορφή μέχρι να συγκλίνουν, οπότε παρουσιάζεται η v -ιοστή επανάληψη που συνέκλινε η μέθοδος και η τιμή της εξαρτημένης μεταβλητής στη δεδομένη χρονο-χωρική στιγμή.

Στα σχ. 4.11 & σχ. 4.12 , αφενός παρουσιάζεται η πορεία που ακολουθείται προκειμένου να ορίσουμε τα κριτήρια σύγκλισης και επιπλέον οι γραφικές απεικονίσεις που αναμένονται όταν η μέθοδος συγκλίνει και όταν όχι.



Σχήμα 4.11. Πορεία μεθόδου ορισμού κριτηρίου σύγκλισης και παράλληλα αποτύπωσης των αποτελεσμάτων σε γράφημα (plot)



Σχήμα 4.12. Χρονικό βήμα διάρκειας 60 sec, 3 χρονικά βήματα και 50 επαναλήψεις ανά χρονικό βήμα. 3 συγκλίσεις στις επαναλήψεις 21, 51 & 64 .

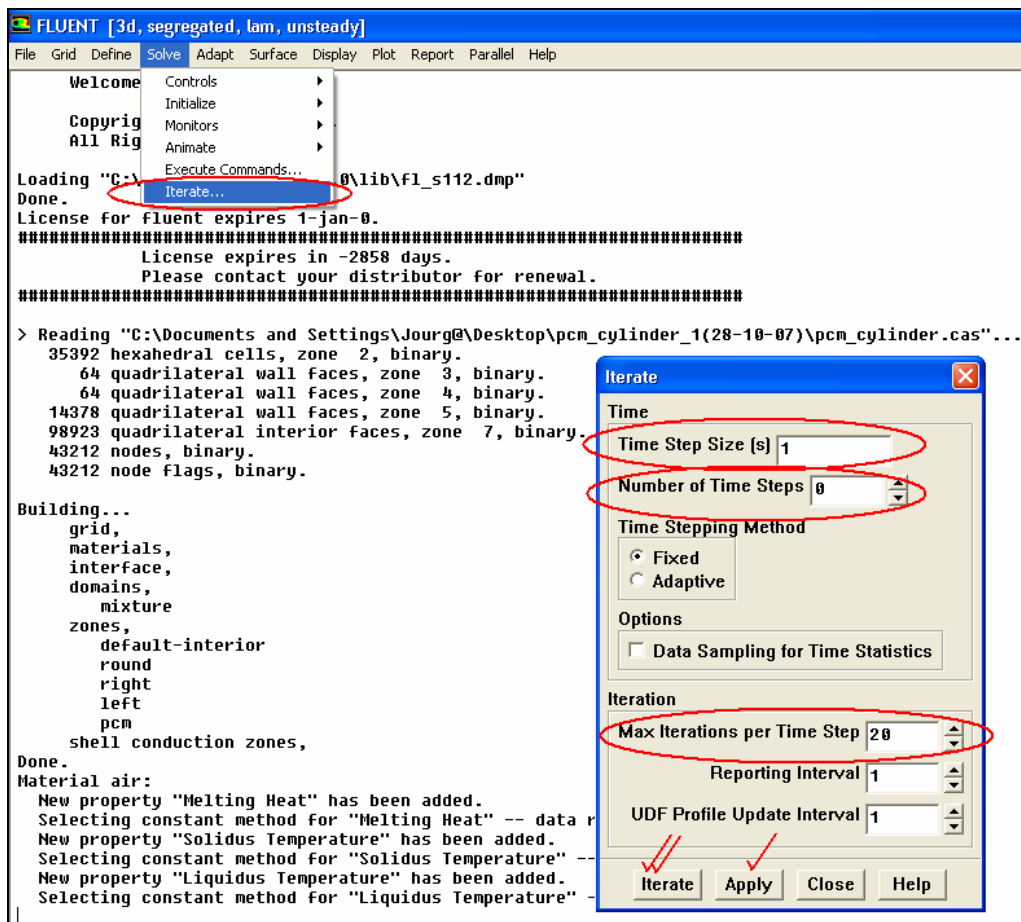
4.3.4.4 Εντολές που αφορούν τον αριθμό των επαναλήψεων ανά χρονικό βήμα

Ένας σημαντικός παράγοντας που επηρεάζει την επίλυση της αριθμητικής μεθόδου είναι ο αριθμός των επαναλήψεων που θα πραγματοποιηθούν υπό καθορισμένες συνθήκες. Οι βασικότερες επιλογές που μας δίνονται όσον αφορά τις επαναλήψεις είναι οι κάτωθι :

1. (*Time step size*) : Ορισμός διάρκειας χρονικού βήματος
2. (*Number of time steps*) : Ορισμός αριθμού χρονικού βήματος
3. (*Max iterations per time step*) : Μέγιστος αριθμός επαναλήψεων αν χρονικό βήμα

Σε φαινόμενα στερεοποίησης και τήξης η επιλογή χρονικού βήματος είναι πολύ σημαντική. Από παρατηρήσεις έχει αποδειχθεί ότι η επιλογή μικρότερου χρονικού βήματος δίνει σταθερότητα στη λύση και η μέθοδος συγκλίνει πιο εύκολα, ωστόσο για μια τέτοια επιλογή απαιτείται αρκετά μεγάλη υπολογιστική ισχύς.

Στο σχ. 4.13 που ακολουθεί, παρουσιάζεται η πορεία για τον ορισμό των παραμέτρων των χρονικών επαναλήψεων και υπενθυμίζεται ότι για να υφίστανται τέτοιου είδους επαναλήψεις το φαινόμενο πρέπει να είναι μη μόνιμο.



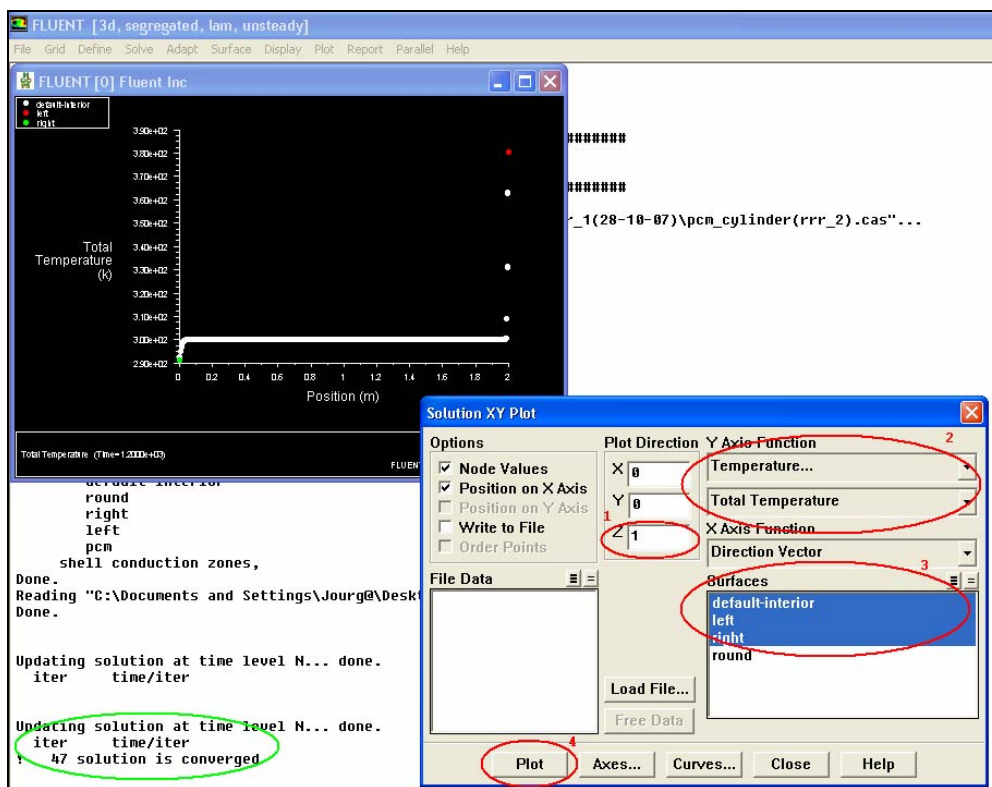
Σχήμα 4.13. Διαδικασία ορισμού χρονικού βήματος και άλλων παραμέτρων

4.3.5 Εντολές που αφορούν την απεικόνιση των αποτελεσμάτων σε περιβάλλον με γραφικά και σε γραφικές παραστάσεις (Plot...)

Το Fluent παρέχει τη δυνατότητα απεικόνισης των αποτελεσμάτων σε γραφήματα και σε περιβάλλον με γραφικά. Για την απεικόνιση των αποτελεσμάτων επιλέγουμε το μέγεθος το οποίο θέλουμε να απεικονίσουμε ανάλογα με τις διαφορικές εξισώσεις που διέπουν το φαινόμενο που μελετάμε. Στη συγκεκριμένη περίπτωση, από την εξίσωση της ενέργειας μας ενδιαφέρει η κατανομή της θερμοκρασίας κατά μήκος του κυλίνδρου, κατά τον άξονα z. Η θερμοκρασία μπορεί να είναι είτε ολική είτε στατική εφόσον δεν εισάγονται όροι ταχύτητας και το φαινόμενο δεν έχει ροή ρευστού.

Στο σχ. 4.14 παρουσιάζεται η πορεία για τη σχεδίαση ενός γραφήματος της κατανομής της θερμοκρασίας κατά μήκος του κυλίνδρου. Ένα άλλο σημαντικό μέγεθος που θα ήταν σκόπιμο να παρακολουθούμε είναι το κλάσμα υγρού (*liquid fraction*), το οποίο λαμβάνει τιμές από 0 – 1, και συμβολίζεται με β , δηλαδή :

$$\beta \in [0,1] \rightarrow \begin{cases} \beta = 0 \rightarrow \text{solid} \\ \beta = 1 \rightarrow \text{liquid} \end{cases}$$



Σχήμα 4.14. Διαδικασία σχεδίασης γραφήματος $T = f(x)$, όπου σαν μέγιστες και ελάχιστες θερμοκρασίες των άκρων έχουν ληφθεί οι $T_{right} = 400\text{ K}$ & $T_{left} = 270\text{ K}$. Η λευκή καμπύλη αντιπροσωπεύει το υλικό αλλαγής φάσης και το πράσινο και κόκκινο σημείο τις θερμοκρασίες στα άκρα.

Κεφάλαιο 5^ο

Προσομοίωση και υπολογισμοί στο Fluent

5.1 Εισαγωγή – Παραδοχές

Η διπλωματική εργασία πραγματεύεται την εύρεση της χρονικής και χωρικής στιγμής όπου ένα υλικό αλλαγής φάσης, με γνωστές φυσικοχημικές ιδιότητες, αλλάζει φάση και από στερεό μετατρέπεται σε υγρό, αναζητούμε δηλαδή την χρονική και χωρική θέση της διεπιφάνειας αλλαγής φάσης του υλικού μας.

Η γεωμετρία του κυλίνδρου καθώς και το υπολογιστικό πλέγμα κατασκευάστηκαν στο σχεδιαστικό πακέτο Gambit ενώ για το υπολογιστικό μέρος χρησιμοποιήθηκε το υπολογιστικό πακέτο Fluent.

Για την μοντελοποίηση χρησιμοποιήσαμε έναν κύλινδρο, μήκους 2 m και ακτίνας 0.015 m, του οποίου το πάχος θεωρήσαμε αμελητέο. Το υπολογιστικό πλέγμα της γεωμετρίας αποτελείται από εξαγωνικά και πυραμιδοειδή στοιχεία και η διακριτοποίηση του πλέγματος έγινε με 25 διαμερίσεις περιφερειακά του κυλίνδρου. Επιπλέον για τις ανάγκες της προσομοίωσης επιλέξαμε ότι η περιφερειακή επιφάνεια του κυλίνδρου δεν συναλλάσσει θερμότητα με το περιβάλλον, δηλαδή έχει αδιαβατικά τοιχώματα περιφερειακά. Ακόμα θεωρούμε ότι το υλικό αλλαγής φάσης που ευρίσκεται στο εσωτερικό του κυλίνδρου θερμαίνεται αμφίπλευρα και η θερμοκρασία του ενός άκρου είναι αρκετά μεγαλύτερη από τη θερμοκρασία τήξης του υλικού, για να επιταχυνθεί το φαινόμενο.

Για την προσέγγιση του προβλήματος είναι σκόπιμο να αναφέρουμε ορισμένες παραδοχές οι οποίες πραγματοποιήθηκαν :

- Οι θερμοφυσικές ιδιότητες του υλικού αλλαγής φάσης παραμένουν αμετάβλητες συναρτήσει της θερμοκρασίας
- Το υλικό αλλαγής φάσης στην αρχική του κατάσταση είναι πλήρως στερεό
- Το υλικό αλλαγής φάσης παρουσιάζει ομοιογένεια σύστασης και είναι ιστροπικό
- Όλες οι επιμέρους μονάδες του υλικού αλλαγής φάσης είναι ανεξάρτητες μεταξύ τους
- Θεωρούμε ότι το φαινόμενο είναι μη μόνιμο και εξελίσσεται συναρτήσει του χρόνου
- Θεωρούμε ότι δεν έχουμε ροή ρευστού, οπότε οι όροι ταχύτητας αμελούνται
- Η μορφή της μετάδοσης θερμότητας που υφίσταται είναι αγωγή, η οποία υπακούει στο νόμο του Fourier

Κατόπιν πολλαπλών δοκιμών που πραγματοποιήθηκαν για την ορθή εξαγωγή των αποτελεσμάτων παρατηρήθηκε ότι οι βασικότεροι παράγοντες που επηρεάζουν την εξέλιξη του φαινομένου είναι οι ακόλουθοι :

1. Η σταθερά ζώνης τήξης (*Mushy Zone Constant, A_{mush}*) η οποία λαμβάνει τιμές : $A_{mush} = (10^4, 10^7)$, παρατηρήθηκε ότι όσο αυξάνεται η τιμή της σταθεράς τόσο επιταχύνεται η διαδικασία της τήξης αλλά αυξανόμενης της τιμής της αυξάνονται και οι απαιτήσεις υπολογιστικής ισχύος.
2. Ένας άλλος σημαντικός παράγοντας ο οποίος επηρεάζει τα αποτελέσματα είναι ο ορισμός των συντελεστών υποχαλάρωσης (*under-relaxation factors*). Παρατηρούμε ότι σε γενικές γραμμές μικρές τιμές των συντελεστών υποχαλάρωσης δίνουν καλύτερα αποτελέσματα.
3. Η θερμοκρασιακή διαφορά που εφαρμόζεται στα άκρα του κυλίνδρου επηρεάζει την πορεία του φαινομένου, διότι όσο αυξάνεται η διαφορά τόσο επιταχύνεται η διαδικασία της τήξης στο υλικό αλλαγής φάσης.
4. Τέλος σημαντικός παράγοντας για την επίλυση της αριθμητικής μεθόδου είναι το χρονικό βήμα που επιλέγεται. Παρατηρήθηκε ότι όσο πιο μικρό είναι το χρονικό βήμα τόσο πιο ακριβή είναι τα αποτελέσματά μας αλλά απαιτείται μεγαλύτερος χρόνος για την εξελικτική πορεία του φαινομένου και συνεπώς αυξημένη υπολογιστική ισχύς.

Στις παραγράφους που ακολουθούν παρουσιάζονται τα αποτελέσματα από τις επαναληπτικές διαδικασίες που πραγματοποιήθηκαν με συγκεκριμένες παραμέτρους. Αναφέρουμε ότι τα δεδομένα τα οποία θα παραμένουν σταθερά σε κάθε « υπολογιστικό σενάριο » είναι τα εξής :

- Το υπολογιστικό πλέγμα και η γεωμετρία του κυλίνδρου
- Οι θερμοφυσικές ιδιότητες του υλικού αλλαγής φάσης και κυρίως οι τρεις χαρακτηριστικές θερμοκρασίες : $T_S = 300.6 K$, $T_L = 300.7 K$ & $T_m = 300.7 K$
- Τα περιφερειακά τοιχώματα του κυλίνδρου και συνεπώς του υλικού αλλαγής φάσης είναι αδιαβατικά
- Η αρχική τιμή της θερμοκρασίας που εκλέγεται σε κάθε υπολογιστικό σενάριο θα αναφέρεται στον εκάστοτε πίνακα πληροφοριών

Η παρουσίαση των αποτελεσμάτων θα αναφέρει ρητά σε κάθε « υπολογιστικό σενάριο » τις παραμέτρους που μεταβάλλονται.

5.2 Υπολογιστικά σενάρια με βάση τη Σταθερά Ζώνης Τήξης, A_{Mush}

5.2.1 Εισαγωγή – Ορισμός σταθερών τιμών παραμέτρων

Ένα βασικό κριτήριο που επηρεάζει την εξέλιξη της επίλυσης των φαινομένων τήξης και στερεοποίησης είναι η σταθερά ζώνης τήξης (A_{mush}) η οποία λαμβάνει τιμές : $A_{mush} = (10^4, 10^7)$. Από το ίδιο το εγχειρίδιο οδηγιών του Fluent, αναφέρεται ότι η πιο αντιπροσωπευτική τιμή της σταθερά είναι $A_{mush} = 10^5$, τιμή η οποία λαμβάνεται σταθερή για τις περισσότερες των περιπτώσεων. Ωστόσο από βιβλιογραφικές αναφορές, αυξανόμενη της τιμής της σταθεράς, μέχρι ενός ορίου των $A_{mush} = 10^7$, η πορεία στερεοποίησης ή τήξης του φαινομένου επιταχύνεται, ενώ ακόμα μεγαλύτερες τιμές της σταθεράς οδηγούν σε αστάθεια.

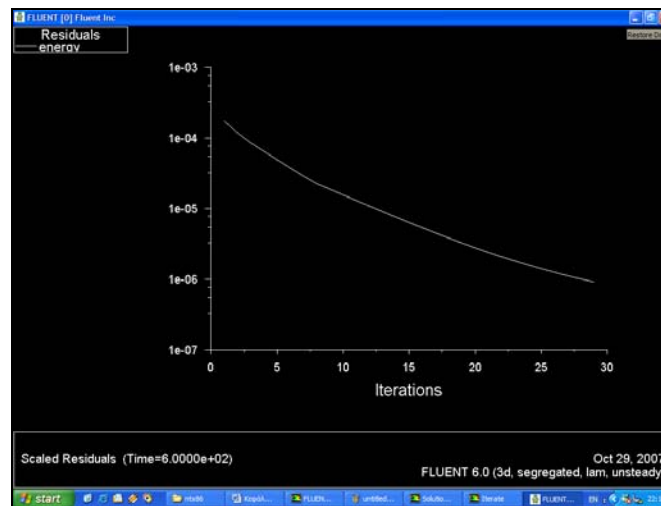
Τα υπολογιστικά σενάρια που ακολουθούν, δίνουν μια παραμετρική άποψη για τις μεταβολές που προκαλούνται για διάφορες τιμές της σταθεράς A_{mush} . Η αριθμητική επίλυση του φαινομένου γίνεται διατηρώντας τις παρακάτω παραμέτρους και συνθήκες σταθερές :

- Συντελεστές υποχαλάρωσης λαμβάνονται σε όλες τις περιπτώσεις ίσοι προς 0.3
- Το χρονικό βήμα που επιλέγεται είναι : 10 min = 600 sec, αριθμός χρονικών βημάτων : 1, αριθμός επαναλήψεων ανά χρονικό βήμα : 50
- Οι θερμοκρασιακές διαφορές στα άκρα του κυλίνδρου λαμβάνουν δύο ζεύγη τιμών : $(T_{left} = 400 K, T_{right} = 290 K)_1$ & $(T_{left} = 340 K, T_{right} = 290 K)_2$
- Η τιμή της σταθεράς ζώνης τήξης A_{mush} , θα λάβει δύο ζεύγη τιμών τα οποία είναι τα ακόλουθα : $(A_{mush} = 10^5)_1$ & σταθεράς $(A_{mush} = 10^7)_2$

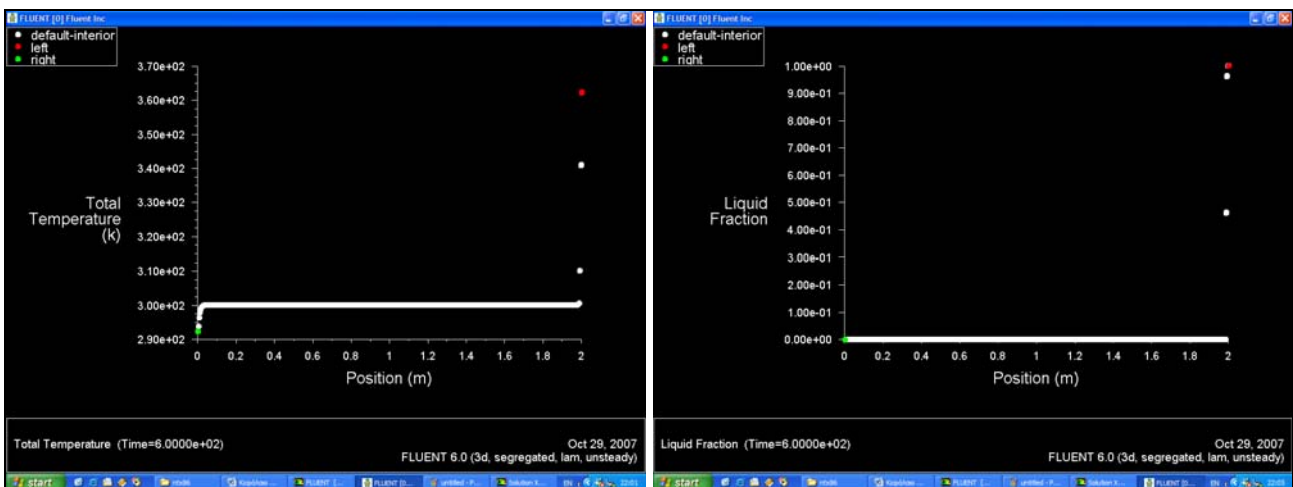
5.2.2 Υπολογιστικό σενάριο 2.1

Οι απαιτούμενες πληροφορίες για το υπολογιστικό σενάριο παρουσιάζονται στον πίνακα πληροφοριών που ακολουθεί. Θα απεικονιστούν τα διαγράμματα σύγκλισης των σταθμικών υπολοίπων στην εξίσωση της ενέργειας και κατόπιν τα διαγράμματα κατανομής της θερμοκρασίας και του κλάσματος τήξης κατά μήκος του κυλίνδρου.

Πίνακας πληροφοριών υπολογιστικού σεναρίου 2.1	
Χαρακτηριστικό μέγεθος	Τιμή επανάληψης
A_{mush}	10^5
T_{left}	400 K
T_{right}	290 K
$T_{initial}$	300 K
Κριτήριο σύγκλισης στη εξίσωση της ενέργειας	10^{-6}



Σχήμα 5.1 Διαδικασία σύγκλισης σταθμικών υπολοίπων στην εξίσωση της ενέργειας για το υπολογιστικό σενάριο 2.1 (Σύγκλιση μετά από 29 επαναλήψεις)

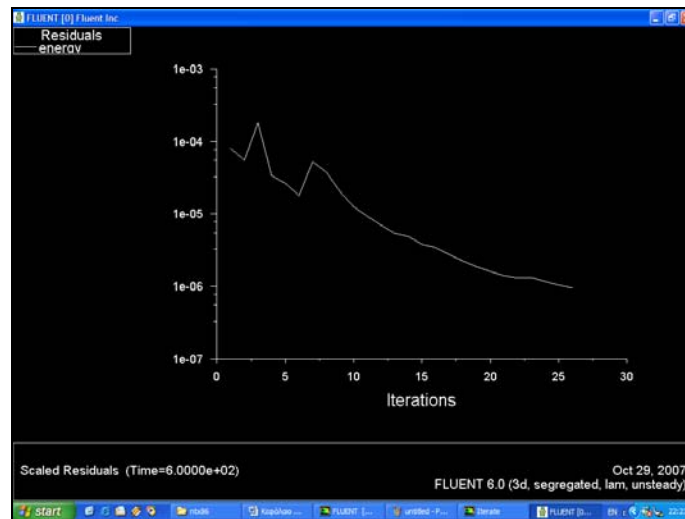


Σχήμα 5.2 Διαγράμματα Θερμοκρασίας και Κλάσματος τήξης συναρτήσει της μετατόπισης

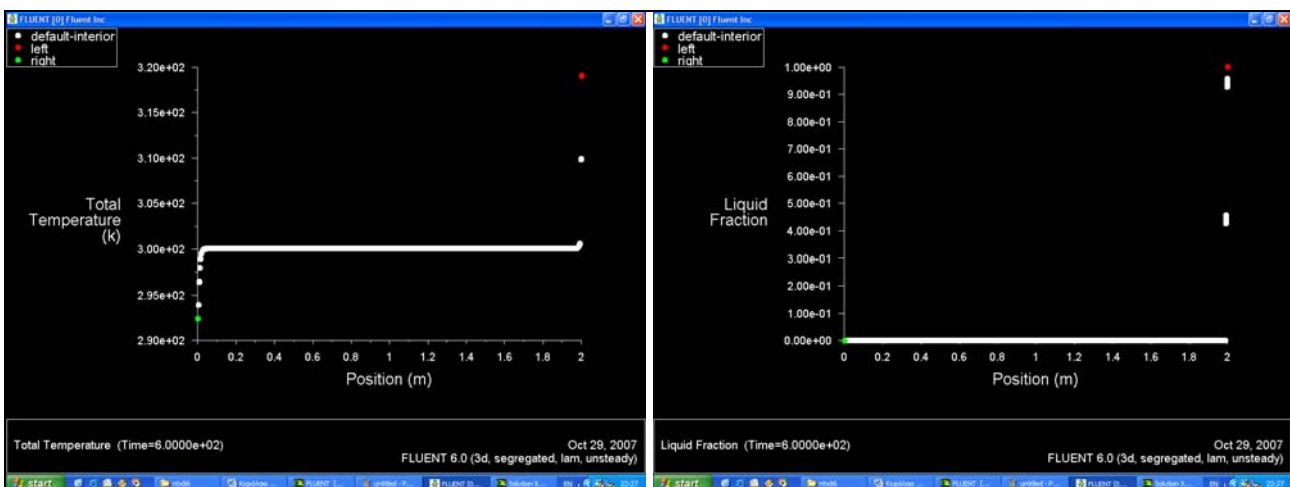
5.2.3 Υπολογιστικό σενάριο 2.2

Οι απαιτούμενες πληροφορίες για το υπολογιστικό σενάριο παρουσιάζονται στον πίνακα πληροφοριών που ακολουθεί. Θα απεικονιστούν τα διαγράμματα σύγκλισης των σταθμικών υπολοίπων στην εξίσωση της ενέργειας και κατόπιν τα διαγράμματα κατανομής της θερμοκρασίας και του κλάσματος τήξης κατά μήκος του κυλίνδρου.

Πίνακας πληροφοριών υπολογιστικού σεναρίου 2.2	
Χαρακτηριστικό μέγεθος	Τιμή επανάληψης
A_{mush}	10^5
T_{left}	340 K
T_{right}	290 K
$T_{initial}$	300 K
Κριτήριο σύγκλισης στη εξίσωση της ενέργειας	10^{-6}



Σχήμα 5.3 Διαδικασία σύγκλισης σταθμικών υπολοίπων στην εξίσωση της ενέργειας για το υπολογιστικό σενάριο 2.2 (Σύγκλιση μετά από 26 επαναλήψεις)

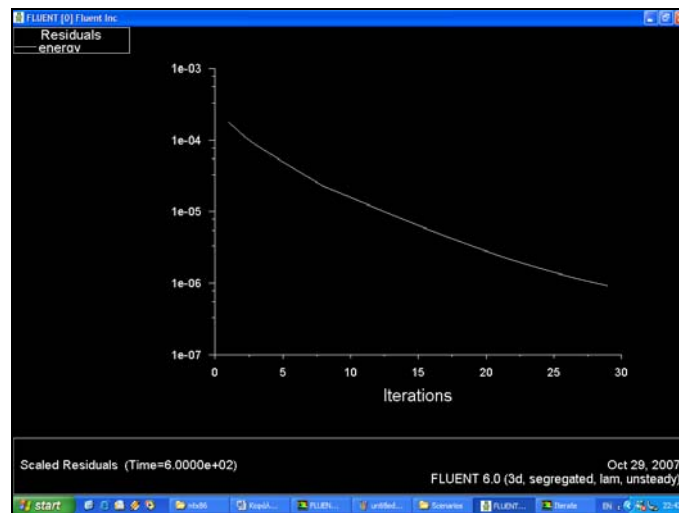


Σχήμα 5.4 Διαγράμματα Θερμοκρασίας και Κλάσματος τήξης συναρτήσει της μετατόπισης

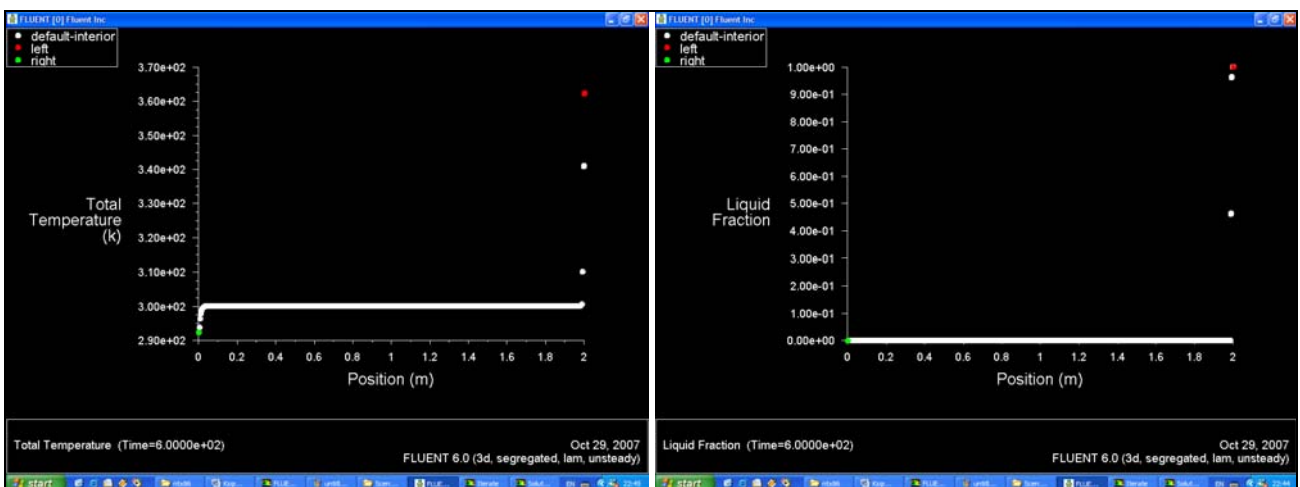
5.2.4 Υπολογιστικό σενάριο 2.3

Οι απαιτούμενες πληροφορίες για το υπολογιστικό σενάριο παρουσιάζονται στον πίνακα πληροφοριών που ακολουθεί. Θα απεικονιστούν τα διαγράμματα σύγκλισης των σταθμικών υπολοίπων στην εξίσωση της ενέργειας και κατόπιν τα διαγράμματα κατανομής της θερμοκρασίας και του κλάσματος τήξης κατά μήκος του κυλίνδρου.

Πίνακας πληροφοριών υπολογιστικού σεναρίου 2.2	
Χαρακτηριστικό μέγεθος	Τιμή επανάληψης
A_{mush}	10^7
T_{left}	400 K
T_{right}	290 K
$T_{initial}$	300 K
Κριτήριο σύγκλισης στη εξίσωση της ενέργειας	10^{-6}



Σχήμα 5.5 Διαδικασία σύγκλισης σταθμικών υπολοίπων στην εξίσωση της ενέργειας για το υπολογιστικό σενάριο 2.3 (Σύγκλιση μετά από 29 επαναλήψεις)

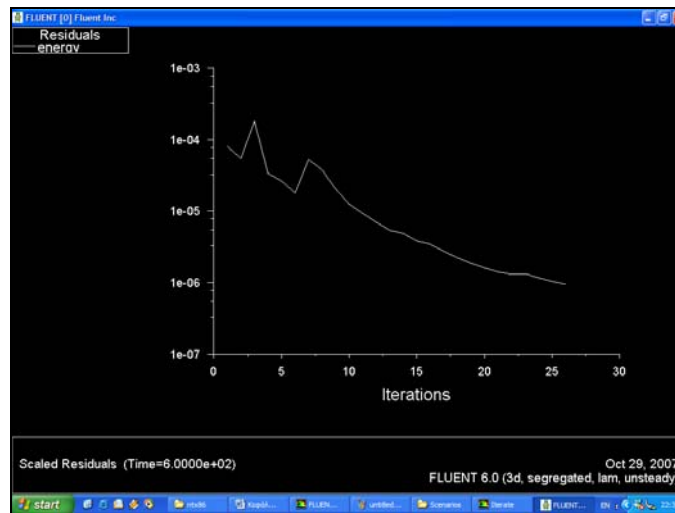


Σχήμα 5.6 Διαγράμματα Θερμοκρασίας και Κλάσματος τήξης συναρτήσει της μετατόπισης

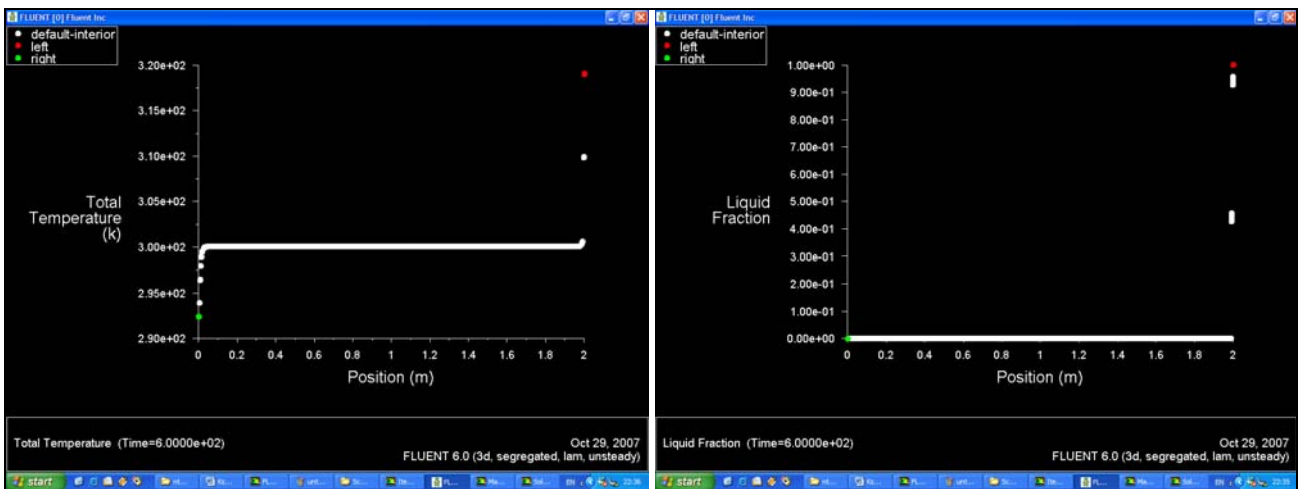
5.2.5 Υπολογιστικό σενάριο 2.4

Οι απαιτούμενες πληροφορίες για το υπολογιστικό σενάριο παρουσιάζονται στον πίνακα πληροφοριών που ακολουθεί. Θα απεικονιστούν τα διαγράμματα σύγκλισης των σταθμικών υπολοίπων στην εξίσωση της ενέργειας και κατόπιν τα διαγράμματα κατανομής της θερμοκρασίας και του κλάσματος τήξης κατά μήκος του κυλίνδρου.

Πίνακας πληροφοριών υπολογιστικού σεναρίου 2.4	
Χαρακτηριστικό μέγεθος	Τιμή επανάληψης
A_{mush}	10^7
T_{left}	340 K
T_{right}	290 K
$T_{initial}$	300 K
Κριτήριο σύγκλισης στη εξίσωση της ενέργειας	10^{-6}



Σχήμα 5.7 Διαδικασία σύγκλισης σταθμικών υπολοίπων στην εξίσωση της ενέργειας για το υπολογιστικό σενάριο 2.4 (Σύγκλιση μετά από 26 επαναλήψεις)



Σχήμα 5.8 Διαγράμματα Θερμοκρασίας και Κλάσματος τήξης συναρτήσει της μετατόπισης

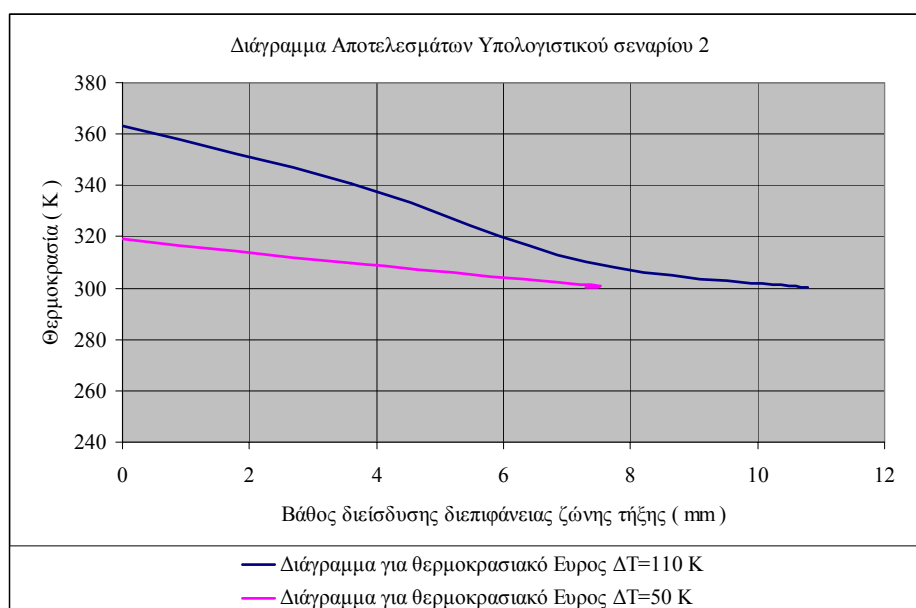
5.2.6 Σχολιασμός αποτελεσμάτων

Από τα αποτελέσματα που προέκυψαν από τις επαναληπτικές διαδικασίες, παρατηρήσαμε ότι η μεταβολή της σταθεράς ζώνης τήξης δεν επηρέασε ουσιαστικά την εξέλιξη του φαινομένου. Ωστόσο η διαφορετική θερμοκρασιακή διαφορά στα άκρα του κυλίνδρου επέφερε τα αναμενόμενα, δηλαδή στο θερμότερο άκρο με θερμοκρασία 400 K η διεπιφάνεια αλλαγής φάσης είχε εισχωρήσει βαθύτερα έναντι της δεύτερης περιπτώσεως όπου η θερμοκρασιακή διαφορά ήταν μικρότερη. Τα αποτελέσματα παρουσιάζονται στον Πιν. 5.1, που ακολουθεί :

Θερμοκρασιακή Διαφορά	$T_{\text{left}} = 400 \text{ K}$ $T_{\text{right}} = 290 \text{ K}$				$T_{\text{left}} = 340 \text{ K}$ $T_{\text{right}} = 290 \text{ K}$		
	Βάθος εισχώρησης διεπιφάνειας αλλαγής φάσης (mm)	0	3.6	7.3	10.8	0	3.6
Επικρατούσα θερμοκρασία (K)	363.04	340.58	310.13	300.56	319.07	309.58	300.54

Πίνακας 5.1. Απεικόνιση αποτελεσμάτων υπολογιστικών σεναρίων με βάση τη σταθερά ζώνης τήξης.

Όπως φαίνεται από τα αποτελέσματα σε χρονικό διάστημα 10 min, η επιφάνεια αλλαγής φάσης έχει μετακινηθεί μόλις μερικά mm και είναι προφανές ότι έχει εισχωρήσει πιο βαθιά εκεί που το θερμοκρασιακό εύρος είναι μεγαλύτερο. Τέλος για θερμοκρασιακό εύρος ($\Delta T = 110 \text{ K}$) το βάθος εισχώρησης εκτιμάται στα 10.5 mm, ενώ για θερμοκρασιακό εύρος ($\Delta T = 50 \text{ K}$) το βάθος εισχώρησης είναι 7.5 mm. Στο Δ. 5.1 παρουσιάζονται τα παραπάνω αποτελέσματα σε μορφή γραφήματος.



Διάγραμμα 5.1. Γραφική απεικόνιση αποτελεσμάτων υπολογιστικού σεναρίου 5.2

5.3 Υπολογιστικά σενάρια με βάση τους συντελεστές υποχαλάρωσης

5.3.1 Εισαγωγή – Ορισμός σταθερών τιμών παραμέτρων

Βασικό κριτήριο για τη σύγκλιση της αριθμητικής μεθόδου είναι η επιλογή συντελεστών υποχαλάρωσης. Η επιλογή αυτών των συντελεστών γίνεται με εμπειρικό τρόπο και εξαρτάται από το εκάστοτε φαινόμενο. Στα φαινόμενα τήξης και στερεοποίησης αναφέρεται ότι οι μικρές τιμές των συντελεστών οδηγούν σε ταχύτερη σύγκλιση των αριθμητικών μεθόδων. Προτεινόμενες τιμές κυμαίνονται στο 0.6 – 0.7 ενώ φαινομενικά οι συντελεστές υποχαλάρωσης του κλάσματος τήξης και ενέργειας επηρεάζουν περισσότερο το φαινόμενο.

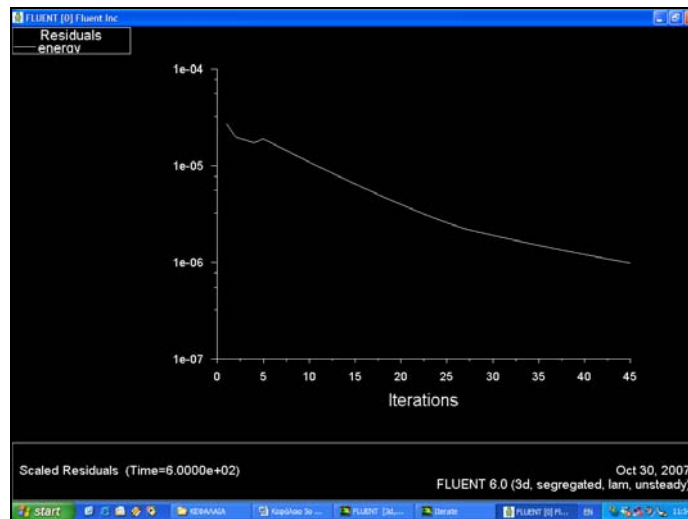
Τα υπολογιστικά σενάρια που ακολουθούν, δίνουν μια παραμετρική άποψη για τις μεταβολές που προκαλούνται για διάφορες τιμές των συντελεστών υποχαλάρωσης. Η αριθμητική επίλυση του φαινομένου γίνεται διατηρώντας τις παρακάτω παραμέτρους και συνθήκες σταθερές :

- Συντελεστές υποχαλάρωσης λαμβάνονται σε όλες τις περιπτώσεις ίσοι προς 0.3 εκτός από τους συντελεστές για το κλάσμα τήξης και ενέργειας, όπου θα αναφέρονται λεπτομέρειες στο εκάστοτε υπολογιστικό σενάριο
- Το χρονικό βήμα που επιλέγεται είναι : 10 min = 600 sec, αριθμός χρονικών βημάτων : 1, αριθμός επαναλήψεων ανά χρονικό βήμα : 50
- Η θερμοκρασιακή διαφορά στα άκρα του κυλίνδρου λαμβάνει τις εξής τιμές : $T_{left} = 340 K$, $T_{right} = 290 K$
- Η τιμή της σταθεράς ζώνης τήξης A_{mush} , θα λάβει την τιμή : $A_{mush} = 10^5$

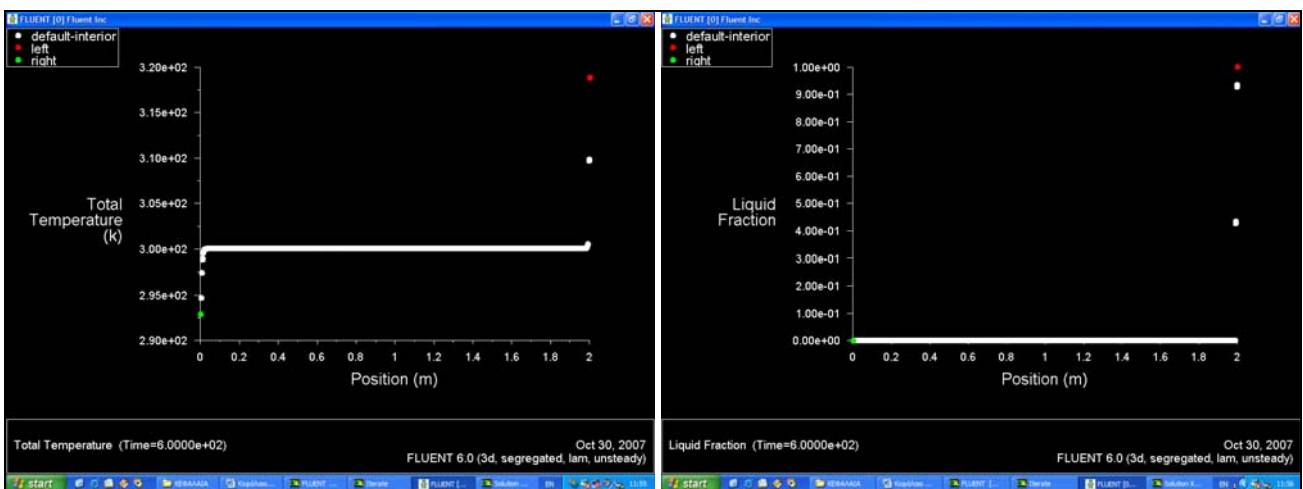
5.3.2 Υπολογιστικό σενάριο 3.1

Οι απαιτούμενες πληροφορίες για το υπολογιστικό σενάριο παρουσιάζονται στον πίνακα πληροφοριών που ακολουθεί. Θα απεικονιστούν τα διαγράμματα σύγκλισης των σταθμικών υπολοίπων στην εξίσωση της ενέργειας και κατόπιν τα διαγράμματα κατανομής της θερμοκρασίας και του κλάσματος τήξης κατά μήκος του κυλίνδρου.

Πίνακας πληροφοριών υπολογιστικού σεναρίου 3.1	
Χαρακτηριστικό μέγεθος	Τιμή επανάληψης
<i>Συντελεστές υποχαλάρωσης (λοιποί)</i>	0.3
<i>Συντελεστής υποχαλάρωσης ζώνης τήξης</i>	0.1
<i>Συντελεστής υποχαλάρωσης ενέργειας</i>	0.1
$T_{initial}$	300 K
<i>Κριτήριο σύγκλισης στη εξίσωση της ενέργειας</i>	10^{-6}



Σχήμα 5.9 Διαδικασία σύγκλισης σταθμικών υπολοίπων στην εξίσωση της ενέργειας για το υπολογιστικό σενάριο 3.1 (Σύγκλιση μετά από 45 επαναλήψεις)

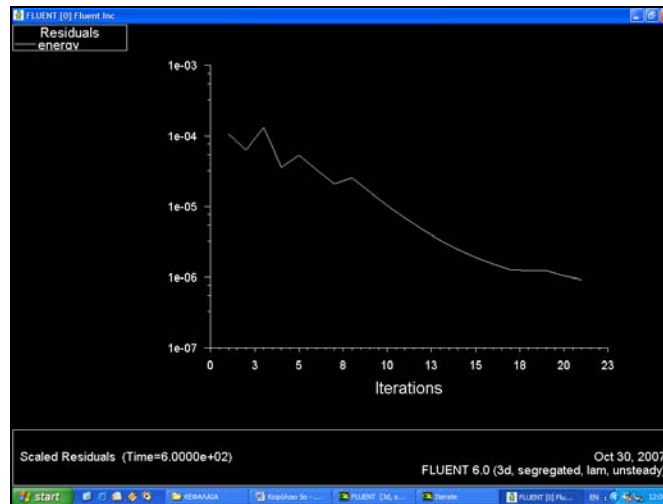


Σχήμα 5.10 Διαγράμματα Θερμοκρασίας και Κλάσματος τήξης συναρτήσει της μετατόπισης

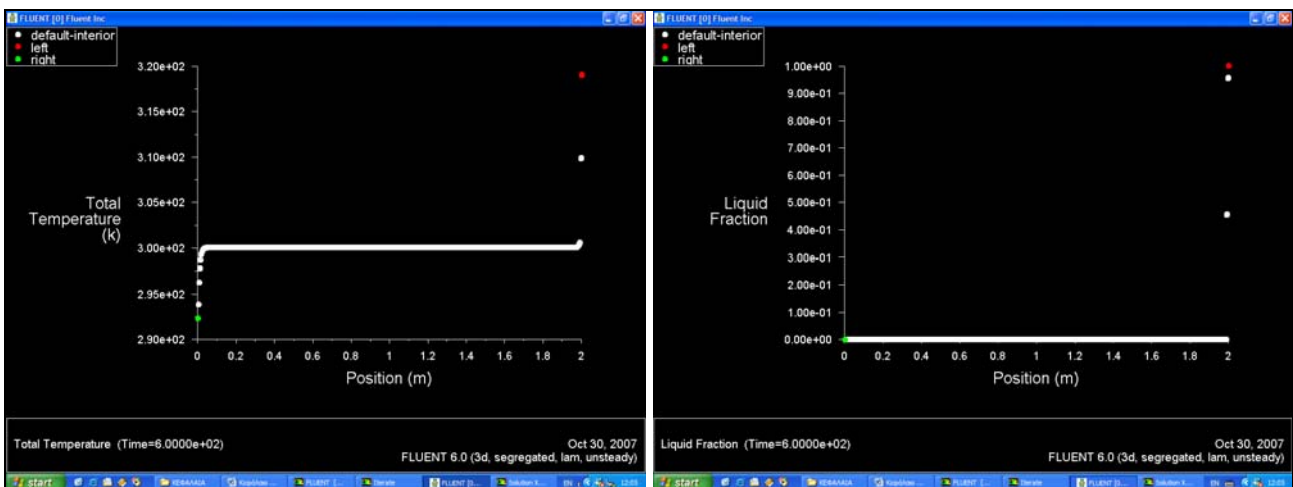
5.3.3 Υπολογιστικό σενάριο 3.2

Οι απαιτούμενες πληροφορίες για το υπολογιστικό σενάριο παρουσιάζονται στον πίνακα πληροφοριών που ακολουθεί. Θα απεικονιστούν τα διαγράμματα σύγκλισης των σταθμικών υπολοίπων στην εξίσωση της ενέργειας και κατόπιν τα διαγράμματα κατανομής της θερμοκρασίας και του κλάσματος τήξης κατά μήκος του κυλίνδρου.

Πίνακας πληροφοριών υπολογιστικού σεναρίου 3.2	
Χαρακτηριστικό μέγεθος	Τιμή επανάληψης
Συντελεστές υποχαλάρωσης (λοιποί)	0.3
Συντελεστής υποχαλάρωσης ζώνης τήξης	0.4
Συντελεστής υποχαλάρωσης ενέργειας	0.4
$T_{initial}$	300 K
Κριτήριο σύγκλισης στη εξίσωση της ενέργειας	10^{-6}



Σχήμα 5.11 Διαδικασία σύγκλισης σταθμικών υπολοίπων στην εξίσωση της ενέργειας για το υπολογιστικό σενάριο 3.2 (Σύγκλιση μετά από 21 επαναλήψεις)

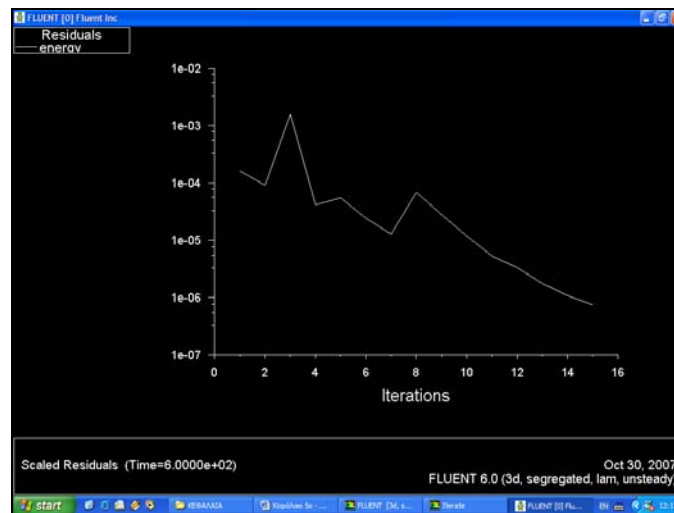


Σχήμα 5.12 Διαγράμματα Θερμοκρασίας και Κλάσματος τήξης συναρτήσει της μετατόπισης

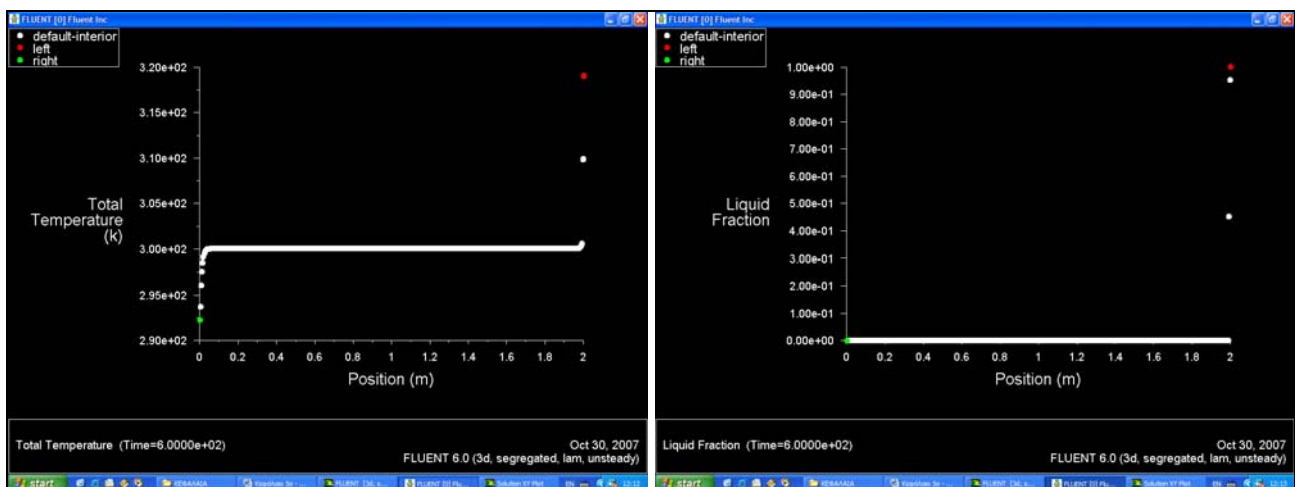
5.3.4 Υπολογιστικό σενάριο 3.3

Οι απαιτούμενες πληροφορίες για το υπολογιστικό σενάριο παρουσιάζονται στον πίνακα πληροφοριών που ακολουθεί. Θα απεικονιστούν τα διαγράμματα σύγκλισης των σταθμικών υπολοίπων στην εξίσωση της ενέργειας και κατόπιν τα διαγράμματα κατανομής της θερμοκρασίας και του κλάσματος τήξης κατά μήκος του κυλίνδρου.

Πίνακας πληροφοριών υπολογιστικού σεναρίου 3.3	
Χαρακτηριστικό μέγεθος	Τιμή επανάληψης
Συντελεστές υποχαλάρωσης (λοιποί)	0.3
Συντελεστής υποχαλάρωσης ζώνης τήξης	0.6
Συντελεστής υποχαλάρωσης ενέργειας	0.6
$T_{initial}$	300 K
Κριτήριο σύγκλισης στη εξίσωση της ενέργειας	10^{-6}



Σχήμα 5.13 Διαδικασία σύγκλισης σταθμικών υπολοίπων στην εξίσωση της ενέργειας για το υπολογιστικό σενάριο 3.3 (Σύγκλιση μετά από 15 επαναλήψεις)

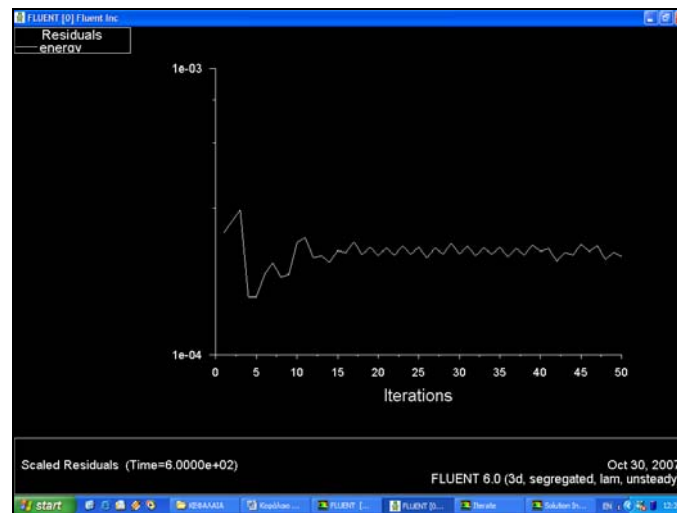


Σχήμα 5.14 Διαγράμματα Θερμοκρασίας και Κλάσματος τήξης συναρτήσει της μετατόπισης

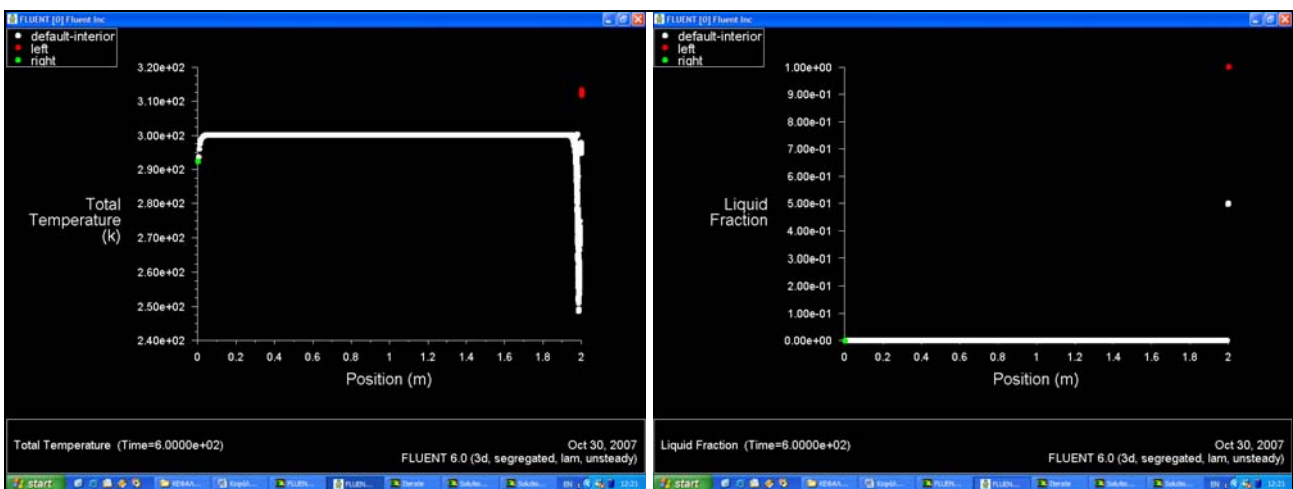
5.3.5 Υπολογιστικό σενάριο 3.4

Οι απαιτούμενες πληροφορίες για το υπολογιστικό σενάριο παρουσιάζονται στον πίνακα πληροφοριών που ακολουθεί. Θα απεικονιστούν τα διαγράμματα σύγκλισης των σταθμικών υπολοίπων στην εξίσωση της ενέργειας και κατόπιν τα διαγράμματα κατανομής της θερμοκρασίας και του κλάσματος τήξης κατά μήκος του κυλίνδρου.

Πίνακας πληροφοριών υπολογιστικού σεναρίου 3.4	
Χαρακτηριστικό μέγεθος	Τιμή επανάληψης
Συντελεστές υποχαλάρωσης (λοιποί)	0.3
Συντελεστής υποχαλάρωσης ζώνης τήξης	1
Συντελεστής υποχαλάρωσης ενέργειας	1
$T_{initial}$	300 K
Κριτήριο σύγκλισης στη εξίσωση της ενέργειας	10^{-6}



Σχήμα 5.15 Διαδικασία σύγκλισης σταθμικών υπολοίπων στην εξίσωση της ενέργειας για το υπολογιστικό σενάριο 3.4 (Δεν είχαμε σύγκλιση)



Σχήμα 5.16 Διαγράμματα Θερμοκρασίας και Κλάσματος τήξης συναρτήσει της μετατόπισης

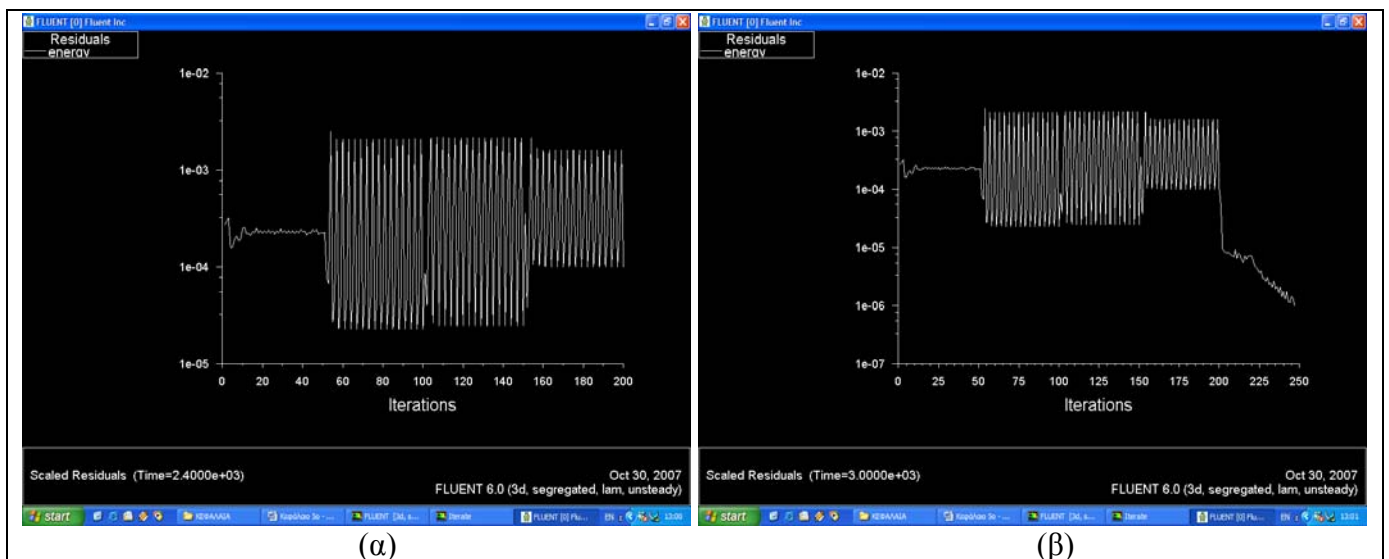
5.3.6 Σχολιασμός αποτελεσμάτων

Από τα αποτελέσματα που προέκυψαν από τις επαναληπτικές διαδικασίες, παρατηρήσαμε ότι η μεταβολή των συντελεστών υποχαλάρωσης επηρέασε ουσιαστικά την εξέλιξη του φαινομένου. Στο χρονικό διάστημα των 10min παρατηρήσαμε ότι όσο αυξανόταν η τιμή του συντελεστή υποχαλάρωσης για τους δύο παράγοντες τόσο γρηγορότερα συνέκλινε η επαναληπτική διαδικασία, ωστόσο μετά από το όριο του 0.7 η διαδικασία δεν συγκλίνει και παρουσιάζει την ταλαντωτική συμπεριφορά που φαίνεται στο σχ. 5.15. Συγκεντρωτικά αποτελέσματα φαίνονται στον Πιν. 5.2, που ακολουθεί :

Συντελεστές υποχαλάρωσης κλάσματος τήξης & ενέργειας	0.1	0.4	0.6	1
Αριθμός επαναλήψεων για σύγκλιση σε 10min	45	21	15	∞

Πίνακας 5.2. Απεικόνιση αποτελεσμάτων υπολογιστικών σεναρίων με τους συντελεστές υποχαλάρωσης.

Από περαιτέρω ερεύνηση των συντελεστών υποχαλάρωσης σε ένα υποθετικό υπολογιστικό σενάριο ελέγξαμε τη συμπεριφορά του φαινομένου σε 4 χρονικά βήματα με μειούμενους τους συντελεστές υποχαλάρωσης των όρων ενέργειας και κλάσματος τήξης διαδοχικά από 1 → 0.9 → 0.9 → 0.8 και η μέθοδος εξακολουθούσε να μην συγκλίνει. Το χρονικό βήμα ήταν 600s και ο αριθμός επαναλήψεων ανά χρονικό βήμα ήταν 50. Τα αποτελέσματα φαίνονται στο σχ. 5. 17. Η διαδικασία σύγκλισης επιτευχθεί μονό όταν μειώθηκαν οι συντελεστές υποχαλάρωσης σε 0.2 όπου η μέθοδος τελικά συνέκλινε μετά από ένα ακόμα βήμα.



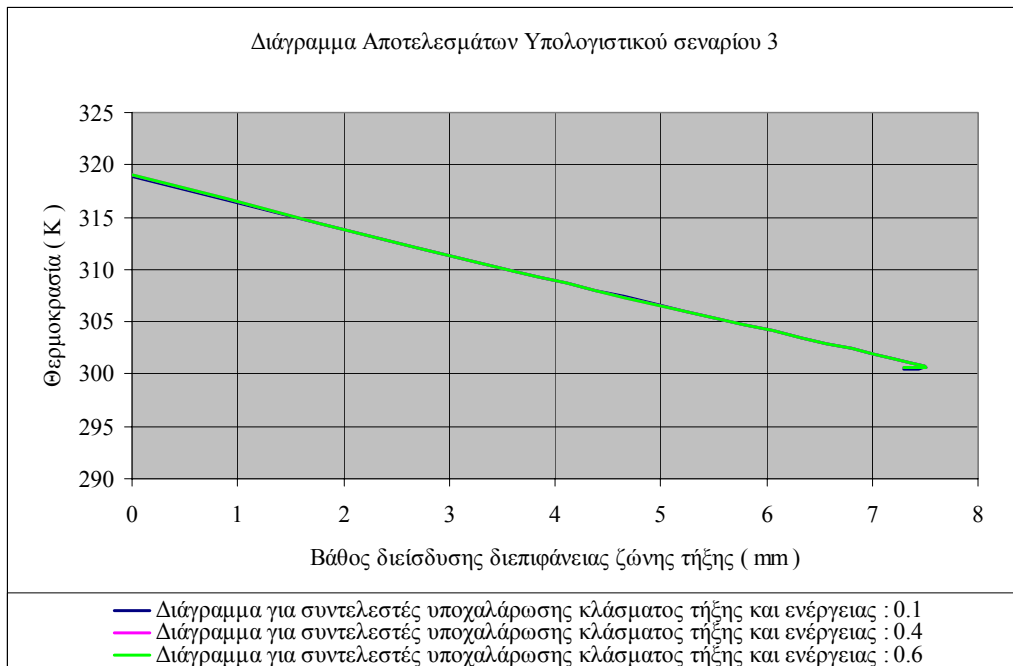
Σχήμα 5.17 (α) Ταλαντωτική συμπεριφορά με μεγάλες τιμές (>0.8) των συντελεστών υποχαλάρωσης (β) σύγκλιση με εφαρμογή μικρότερης τιμής συντελεστή υποχαλάρωσης

Από επεξεργασία των αποτελεσμάτων διεξήχθησαν τα ακόλουθα συμπεράσματα σχετικά με τη θέση της διεπιφάνειας αλλαγής φάσης. Η μετακίνησή της στο χρονικό διάστημα των 10 min ήταν της τάξεως των 7 – 8 mm, για όλες τις περιπτώσεις, οπότε καταλήγουμε στο συμπέρασμα ότι οι συντελεστές υποχαλάρωσης επιφέρουν μεταβολή κυρίως στην ταχύτητα σύγκλισης της μεθόδου και όχι τόσο επί του αποτελέσματος. Τα στοιχεία που προέκυψαν φαίνονται στο Πιν. 5.3 που ακολουθεί.

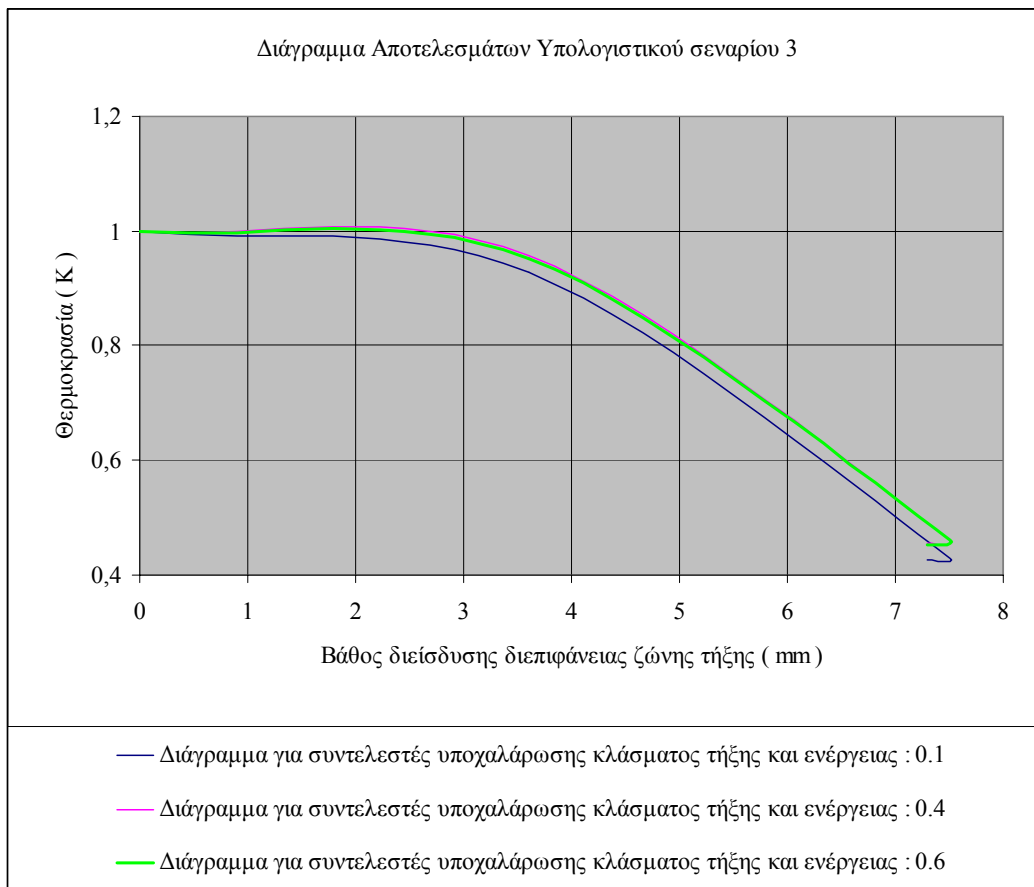
Συντελεστές υποχαλάρωσης κλάσματος τήξης & ενέργειας	0.1			0.4			0.6			1
	Βάθος εισχώρησης διεπιφάνειας αλλαγής φάσης (mm)	0	3.6	7.3	0	3.6	7.3	0	3.6	7.3
Επικρατούσα θερμοκρασία (K)	318.84	309.77	300.53	319.017	309.859	300.59	319.018	309.858	300.57	-
Τιμή του κλάσματος τήξης	1	0.9271	0.4277	1	0.9558	0.4559	1	0.9522	0.45223	-

Πίνακας 5.3. Απεικόνιση αποτελεσμάτων υπολογιστικών σεναρίων με τους συντελεστές υποχαλάρωσης.

Στα διαγράμματα 4. 5.2 & 4. 5.3 παρουσιάζονται τα γραφήματα της θερμοκρασιακής μεταβολής συναρτήσει του βάθους διείσδυσης της διεπιφάνειας αλλαγής φάσης και το διάγραμμα του κλάσματος τήξης σε συνάρτηση με το βάθος διείσδυσης, για το υπολογιστικό σενάριο 5.3.



Διάγραμμα 5.2. Γραφική απεικόνιση αποτελεσμάτων υπολογιστικού σεναρίου 5.3, $T=f(x)$



Διάγραμμα 5.3. Γραφική απεικόνιση αποτελεσμάτων υπολογιστικού σεναρίου 5.3, $\beta=f(x)$.

5.4 Υπολογιστικά σενάρια με βάση τη θερμοκρασιακή διαφορά στα άκρα του κυλίνδρου

5.4.1 Εισαγωγή – Ορισμός σταθερών τιμών παραμέτρων

Όπως φάνηκε από την παράγραφο #5.2# για την επιτάχυνση της μετάδοσης του μετώπου αλλαγής φάσης καθοριστικό ρόλο κατέχει η θερμοκρασία που επικρατεί στα άκρα του κυλίνδρου, συγκεκριμένα όσο αυξάνεται η θερμοκρασία στα άκρα του κυλίνδρου τόσο αυξάνεται και το βάθος διείδυσης του μετώπου αλλαγής φάσης.

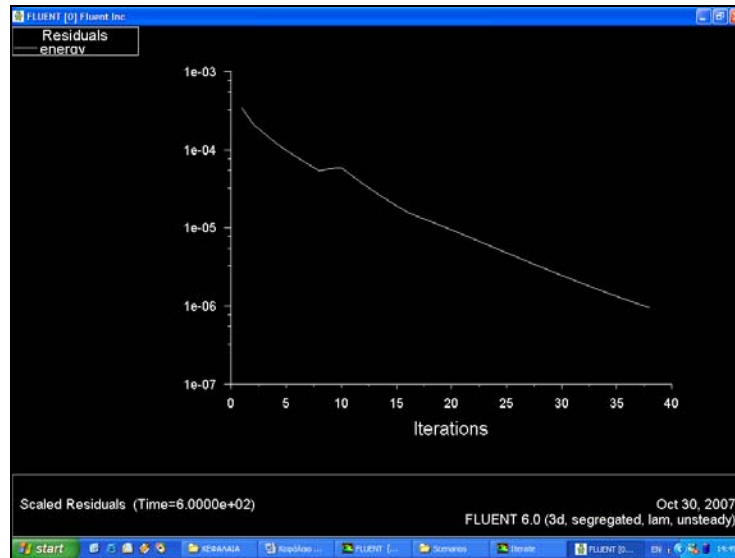
Τα υπολογιστικά σενάρια που ακολουθούν, δίνουν μια παραμετρική άποψη για τις μεταβολές που προκαλούνται για διάφορες τιμές των θερμοκρασιακών πεδίων στα άκρα του κυλίνδρου. Η αριθμητική επίλυση του φαινομένου γίνεται διατηρώντας τις παρακάτω παραμέτρους και συνθήκες σταθερές :

- Συντελεστές υποχαλάρωσης λαμβάνονται σε όλες τις περιπτώσεις ίσοι προς 0.3
- Το χρονικό βήμα που επιλέγεται είναι : 10 min = 600 sec, αριθμός χρονικών βημάτων : 1, αριθμός επαναλήψεων ανά χρονικό βήμα : 50
- Η θερμοκρασιακή διαφορά στα άκρα του κυλίνδρου θα λαμβάνει διάφορες τιμές οι οποίες θα αναφέρονται στον πίνακα πληροφοριών του εκάστοτε υπολογιστικού σεναρίου
- Η τιμή της σταθεράς ζώνης τήξης A_{mush} , θα λάβει την τιμή : $A_{mush} = 10^5$

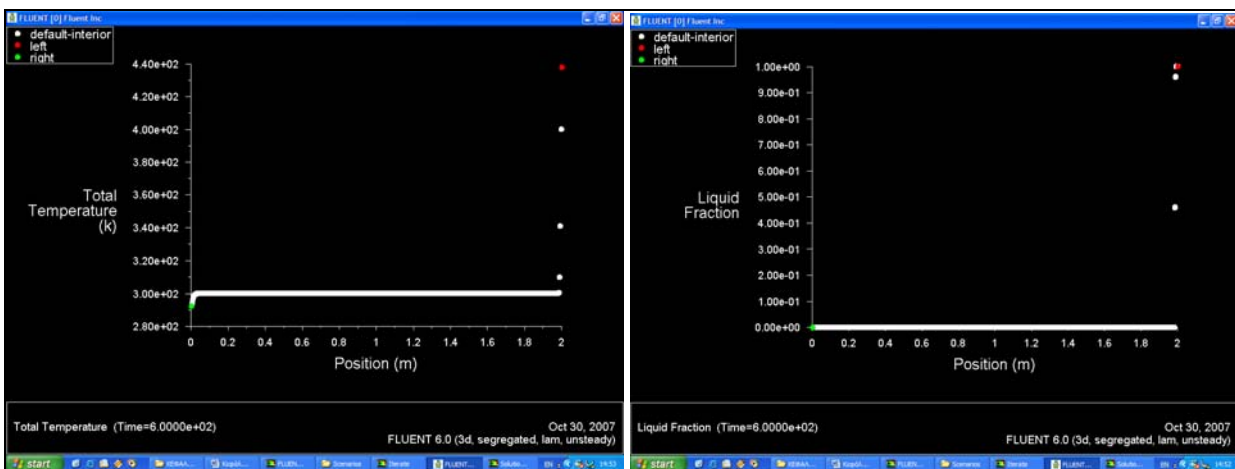
5.4.2 Υπολογιστικό σενάριο 4.1

Οι απαιτούμενες πληροφορίες για το υπολογιστικό σενάριο παρουσιάζονται στον πίνακα πληροφοριών που ακολουθεί. Θα απεικονιστούν τα διαγράμματα σύγκλισης των σταθμικών υπολοίπων στην εξίσωση της ενέργειας και κατόπιν τα διαγράμματα κατανομής της θερμοκρασίας και του κλάσματος τήξης κατά μήκος του κυλίνδρου.

Πίνακας πληροφοριών υπολογιστικού σεναρίου 4.1	
Χαρακτηριστικό μέγεθος	Τιμή επανάληψης
T_{left}	500 K
T_{right}	290 K
$T_{initial}$	300 K
Κριτήριο σύγκλισης στη εξίσωση της ενέργειας	10^{-6}



Σχήμα 5.18 Διαδικασία σύγκλισης σταθμικών υπολοίπων στην εξίσωση της ενέργειας για το υπολογιστικό σενάριο 4.1 (Σύγκλιση μετά από 38 επαναλήψεις)

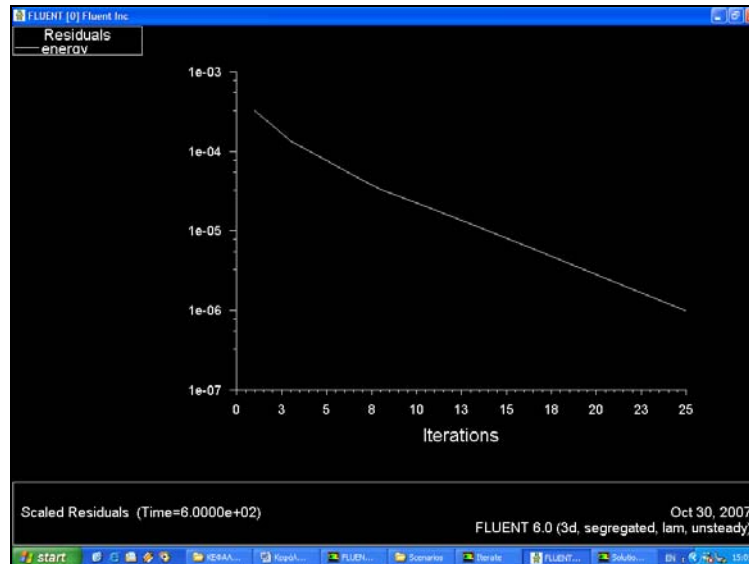


Σχήμα 5.19 Διάγραμμα Θερμοκρασίας και Κλάσματος τήξης συναρτήσει της μετατόπισης

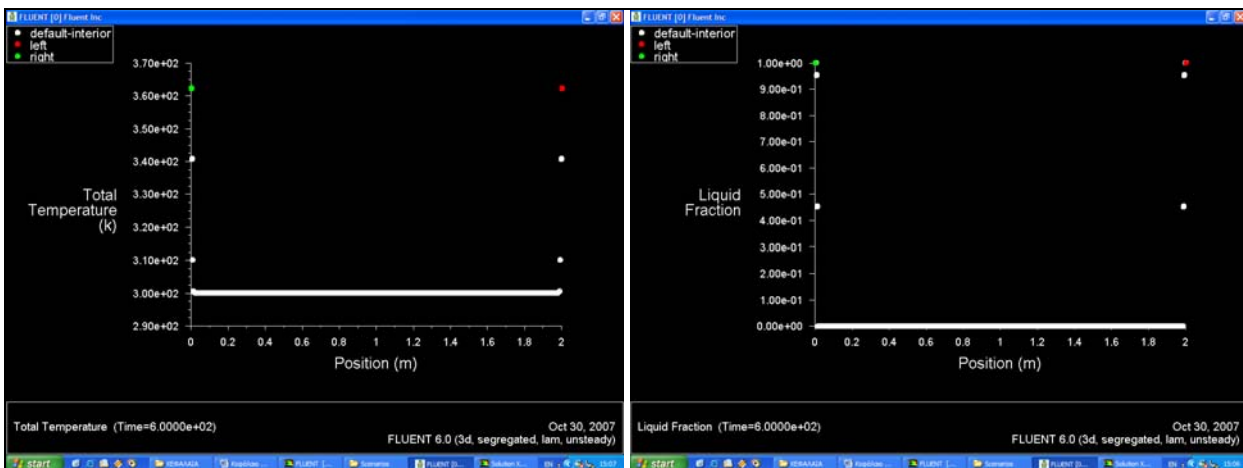
5.4.3 Υπολογιστικό σενάριο 4.2

Οι απαιτούμενες πληροφορίες για το υπολογιστικό σενάριο παρουσιάζονται στον πίνακα πληροφοριών που ακολουθεί. Θα απεικονιστούν τα διαγράμματα σύγκλισης των σταθμικών υπολοίπων στην εξίσωση της ενέργειας και κατόπιν τα διαγράμματα κατανομής της θερμοκρασίας και του κλάσματος τήξης κατά μήκος του κυλίνδρου.

Πίνακας πληροφοριών υπολογιστικού σεναρίου 4.1	
Χαρακτηριστικό μέγεθος	Τιμή επανάληψης
T_{left}	400 K
T_{right}	400 K
$T_{initial}$	300 K
Κριτήριο σύγκλισης στη εξίσωση της ενέργειας	10^{-6}



Σχήμα 5.20 Διαδικασία σύγκλισης σταθμικών υπολοίπων στην εξίσωση της ενέργειας για το υπολογιστικό σενάριο 4.2 (Σύγκλιση μετά από 25 επαναλήψεις)

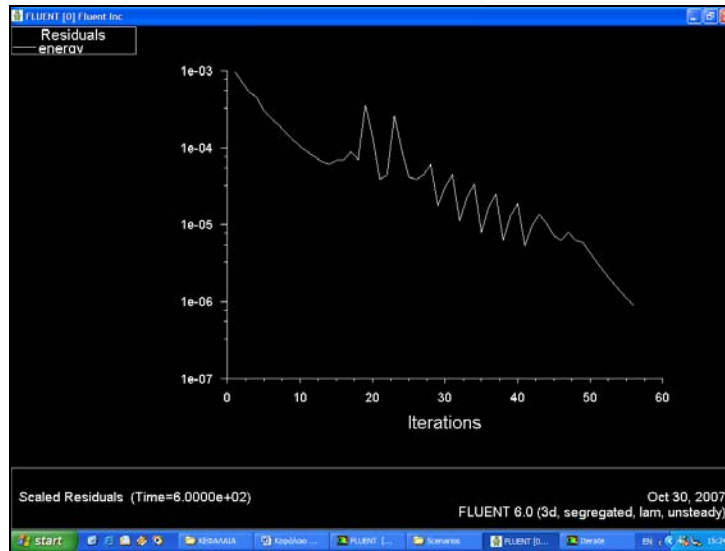


Σχήμα 5.21 Διάγραμμα Θερμοκρασίας και Κλάσματος τήξης συναρτήσει της μετατόπισης

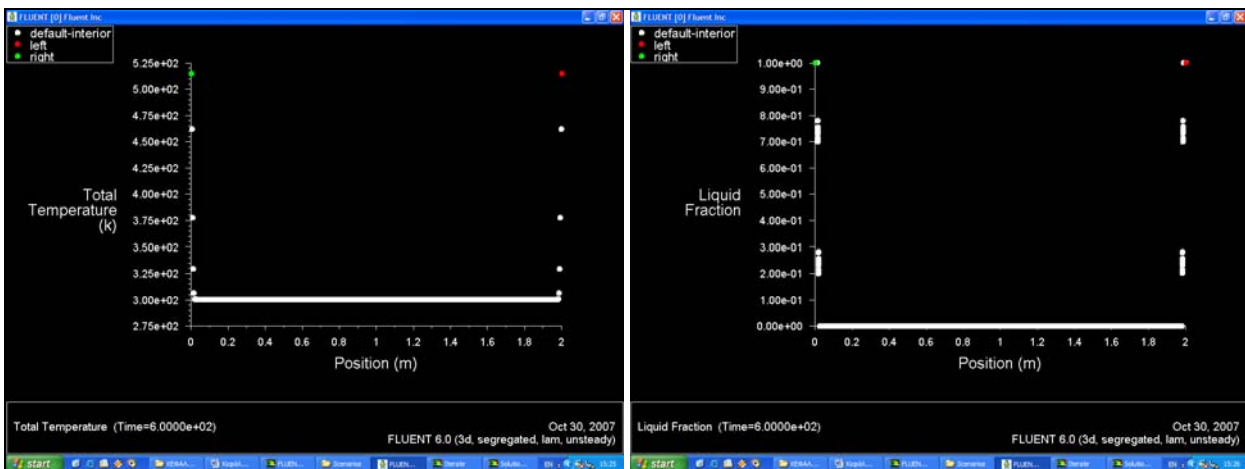
5.4.4 Υπολογιστικό σενάριο 4.3

Οι απαιτούμενες πληροφορίες για το υπολογιστικό σενάριο παρουσιάζονται στον πίνακα πληροφοριών που ακολουθεί. Θα απεικονιστούν τα διαγράμματα σύγκλισης των σταθμικών υπολοίπων στην εξίσωση της ενέργειας και κατόπιν τα διαγράμματα κατανομής της θερμοκρασίας και του κλάσματος τήξης κατά μήκος του κυλίνδρου.

Πίνακας πληροφοριών υπολογιστικού σεναρίου 4.3		
Χαρακτηριστικό μέγεθος	Τιμή επανάληψης	Σημείωση : Στο υπολογιστικό σενάριο 4.3, έγιναν 100 επαναλήψεις ανά χρονικό βήμα
T_{left}	500 K	
T_{right}	500 K	
$T_{initial}$	300 K	
Κριτήριο σύγκλισης στη εξίσωση της ενέργειας	10^{-6}	



Σχήμα 5.22 Διαδικασία σύγκλισης σταθμικών υπολοίπων στην εξίσωση της ενέργειας για το υπολογιστικό σενάριο 4.3 (Σύγκλιση μετά από 56 επαναλήψεις)

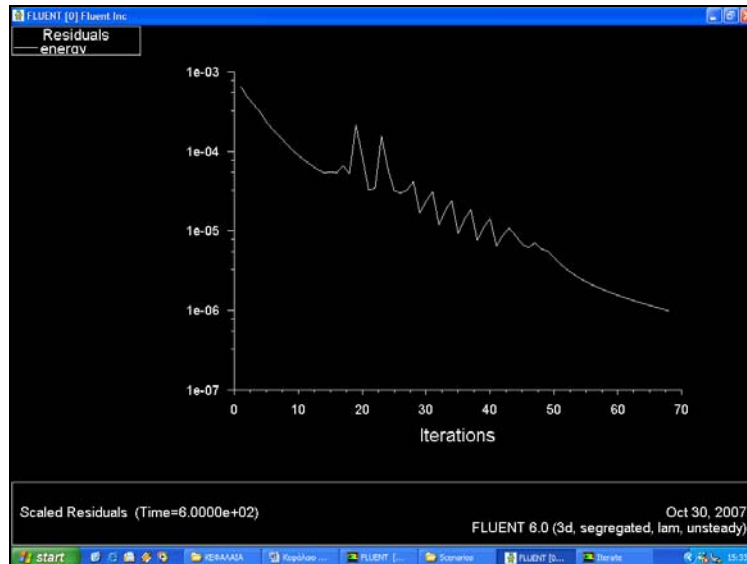


Σχήμα 5.23 Διάγραμμα Θερμοκρασίας και Κλάσματος τήξης συναρτήσει της μετατόπισης

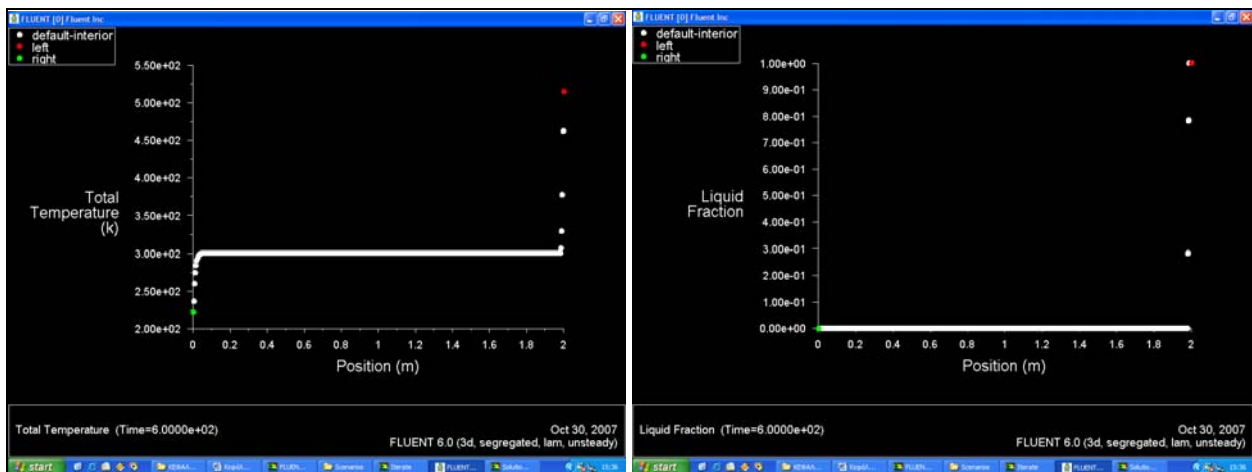
5.4.5 Υπολογιστικό σενάριο 4.4

Οι απαιτούμενες πληροφορίες για το υπολογιστικό σενάριο παρουσιάζονται στον πίνακα πληροφοριών που ακολουθεί. Θα απεικονιστούν τα διαγράμματα σύγκλισης των σταθμικών υπολοίπων στην εξίσωση της ενέργειας και κατόπιν τα διαγράμματα κατανομής της θερμοκρασίας και του κλάσματος τήξης κατά μήκος του κυλίνδρου.

Πίνακας πληροφοριών υπολογιστικού σεναρίου 4.4		
Χαρακτηριστικό μέγεθος	Τιμή επανάληψης	Σημείωση : Στο υπολογιστικό σενάριο 4.3, έγιναν 100 επαναλήψεις ανά χρονικό βήμα
T_{left}	600 K	
T_{right}	200 K	
$T_{initial}$	300 K	
Κριτήριο σύγκλισης στη εξίσωση της ενέργειας	10^{-6}	



Σχήμα 5.24 Διαδικασία σύγκλισης σταθμικών υπολοίπων στην εξίσωση της ενέργειας για το υπολογιστικό σενάριο 4.4 (Σύγκλιση μετά από 68 επαναλήψεις)



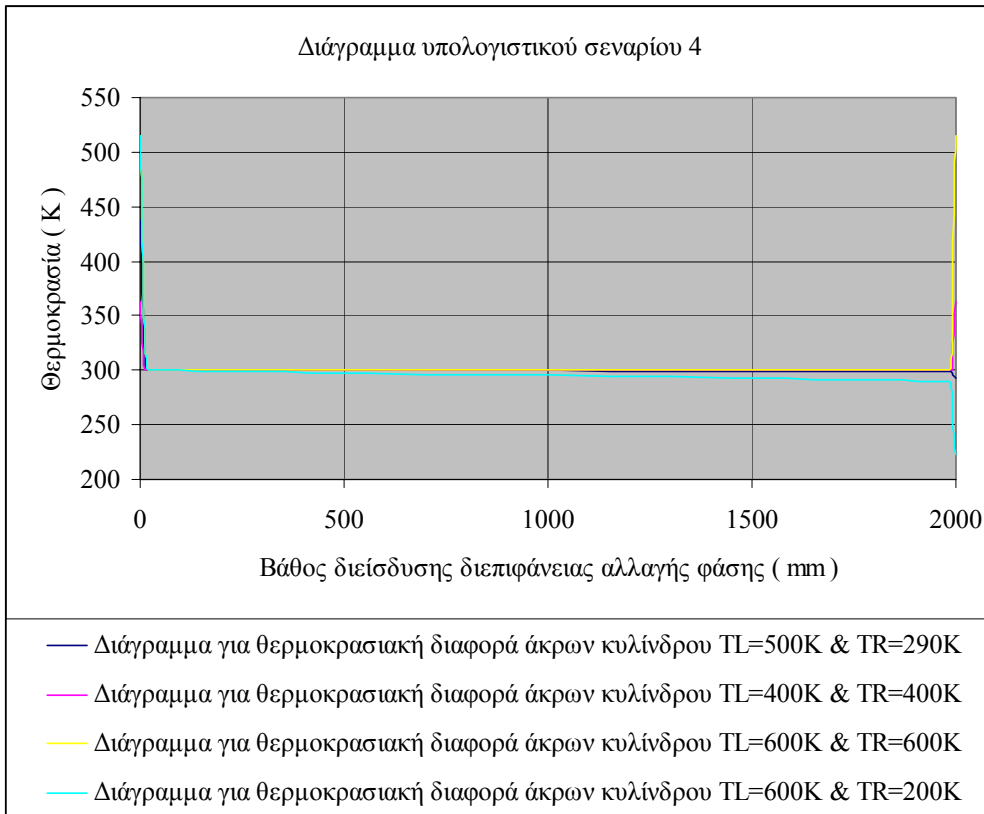
Σχήμα 5.25 Διάγραμμα Θερμοκρασίας και Κλάσματος τήξης συναρτήσει της μετατόπισης

5.4.6 Σχολιασμός αποτελεσμάτων

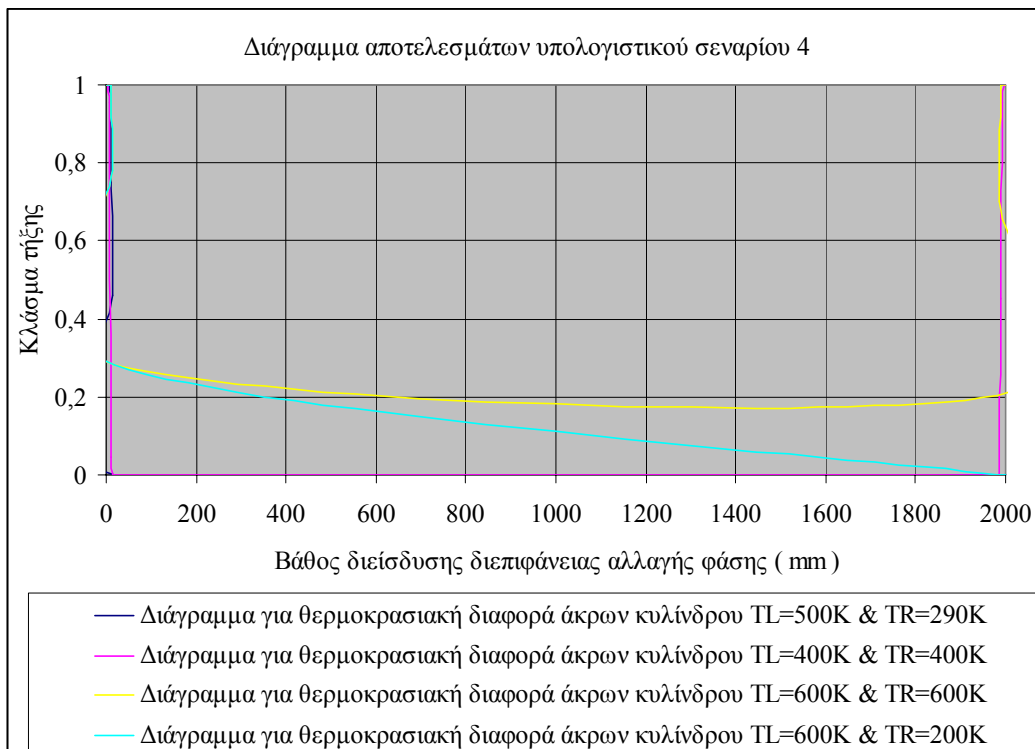
Από τα αποτελέσματα που προέκυψαν από τις επαναληπτικές διαδικασίες, παρατηρήσαμε ότι η μεταβολή των θερμοκρασιών των άκρων του γεωμετρικού μοντέλου, επέφερε μεγάλες μεταβολές στην εξελικτική πορεία του φαινομένου. Κατά τα αναμενόμενα όσο μεγαλύτερη ήταν η θερμοκρασία του άκρου τόσο αυξανόταν το βάθος διείσδυσης της επιφάνειας αλλαγής φάσης. Επιπλέον από τα υπολογιστικά σενάρια #3# & #4#, παρατηρούμε ότι το βάθος διείσδυσης παραμένει είναι ανεξάρτητο από τη θερμοκρασία που επικρατεί στο ψυχρότερο άκρο του κυλίνδρου.

Το γεγονός αυτό φαίνεται να είναι ορθό αφού το ύψος του κυλίνδρου είναι πολύ μεγάλο σε σχέση με τη διατομή του. Προφανώς σε μικρότερης διάστασης γεωμετρίας η θερμοκρασία των άκρων αλληλεπιδρά πιο έντονα στη διάδοση της διεπιφάνειας αλλαγής φάσης. Στον Πιν. 5.4, που ακολουθεί παρουσιάζονται αναλυτικά τα αποτελέσματα που προέκυψαν από την ανάλυση και παρατίθενται τα αντίστοιχα βάθη διείσδυσης για κάθε περίπτωση.

Επιπλέον παρατίθενται τα διαγράμματα θερμοκρασίας και κλάσματος τήξης συναρτήσεως του βάθους διείσδυσης για όλα τα υπολογιστικά σενάρια, τα αντίστοιχα γραφήματα είναι τα Δ. 5.4 & Δ. 5.5.



Διάγραμμα 5.4. Γραφική απεικόνιση αποτελεσμάτων υπολογιστικού σεναρίου 5.4, $T=f(x)$



Διάγραμμα 5.5. Γραφική απεικόνιση αποτελεσμάτων υπολογιστικού σεναρίου 5.4, $\beta=f(x)$

Θερμοκρασιακή διαφορά	Υπολογιστικό σενάριο 4.1 : $T_{\text{left}} = 500 \text{ K}$ & $T_{\text{right}} = 290 \text{ K}$													
Τοπικό μήκος του κυλίνδρου (m)	2000	1996.4	1992.7	1989.2	1985.5	1981.9	1978.3		18.81	14.46	10.85	7.23	3.62	0
Επικρατούσα θερμοκρασία (K)	437.9	400.1	340.89	310.11	300.56	300.34	300.21		299.2	298.6	297.7	296.15	293.7	292.3
Κλάσμα τήξης	1	1	1	0.95977	0.45975	0	0		0	0	0	0	0	0
Βάθος εισχώρησης διεπιφάνειας αλλαγής φάσης (mm) : Από αριστερά : $\approx 14.5 \text{ mm}$ και Από δεξιά : $= 0 \text{ mm}$														

Θερμοκρασιακή διαφορά	Υπολογιστικό σενάριο 4.2 : $T_{\text{left}} = 400 \text{ K}$ & $T_{\text{right}} = 400 \text{ K}$													
Τοπικό μήκος του κυλίνδρου (m)	2000	1996.4	1992.7	1989.2	1985.5	1981.9	1978.3		18.81	14.46	10.85	7.23	3.62	0
Επικρατούσα θερμοκρασία (K)	362.2	340.85	310.89	300.56	300.32	300.2	300.1		300.2	300.33	300.55	310.1	340.8	362.2
Κλάσμα τήξης	1	1	0.9534	0.4535	0	0	0		0	0	0.4527	0.9528	1	1
Βάθος εισχώρησης διεπιφάνειας αλλαγής φάσης (mm) : Από αριστερά : $\approx 10.8 \text{ mm}$ και Από δεξιά : $\approx 10.85 \text{ mm}$														

Θερμοκρασιακή διαφορά	Υπολογιστικό σενάριο 4.3 : $T_{\text{left}} = 600 \text{ K}$ & $T_{\text{right}} = 600 \text{ K}$													
Τοπικό μήκος του κυλίνδρου (m)	2000	1996.4	1992.7	1989.2	1985.5	1981.9	1978.3		18.81	14.46	10.85	7.23	3.62	0
Επικρατούσα θερμοκρασία (K)	514.93	462.04	377.57	329.07	306.41	300.53	300.32		300.53	306.4	329.1	377.5	461.9	514.9
Κλάσμα τήξης	1	1	1	1	0.7805	0.2805	0		0.2013	0.7012	1	1	1	1
Βάθος εισχώρησης διεπιφάνειας αλλαγής φάσης (mm) : Από αριστερά : $\approx 18.1 \text{ mm}$ και Από δεξιά : $\approx 18.8 \text{ mm}$														

Θερμοκρασιακή διαφορά	Υπολογιστικό σενάριο 4.4 : $T_{\text{left}} = 600 \text{ K}$ & $T_{\text{right}} = 200 \text{ K}$													
Τοπικό μήκος του κυλίνδρου (m)	2000	1996.4	1992.7	1989.2	1985.5	1981.9	1978.3		18.81	14.46	10.85	7.23	3.62	0
Επικρατούσα θερμοκρασία (K)	514.9	462.1	377.7	329.2	306.45	300.53	300.33		290.2	284.2	274.7	259.9	236.6	222.4
Κλάσμα τήξης	1	1	1	1	0.7814	0.2814	0		0	0	0	0	0	0
Βάθος εισχώρησης διεπιφάνειας αλλαγής φάσης (mm) : Από αριστερά : $\approx 14.5 \text{ mm}$ και Από δεξιά : $= 0 \text{ mm}$														

Πίνακας 5.4. Συγκεντρωτικά αποτελέσματα υπολογιστικού σεναρίου με βάση τη θερμοκρασιακή διαφορά στα άκρα του κυλίνδρου

5.5 Υπολογιστικά σενάρια με βάση την επιλογή χρονικού βήματος για την εξελικτική πορεία του φαινομένου

5.5.1 Εισαγωγή – Ορισμός σταθερών τιμών παραμέτρων

Τελευταίος παράγοντας ο οποίος θα εξετάσουμε είναι οι παράμετροι της διάρκειας του χρονικού βήματος και τον αριθμό των χρονικών βημάτων. Η γενική άποψη είναι ότι λαμβάνοντας μικρότερο χρονικό βήμα μπορούμε να προσεγγίσουμε με μεγαλύτερη ακρίβεια τα αποτελέσματα που επιζητούμε ωστόσο οι απαιτήσεις υπολογιστικής ισχύος αυξάνονται.

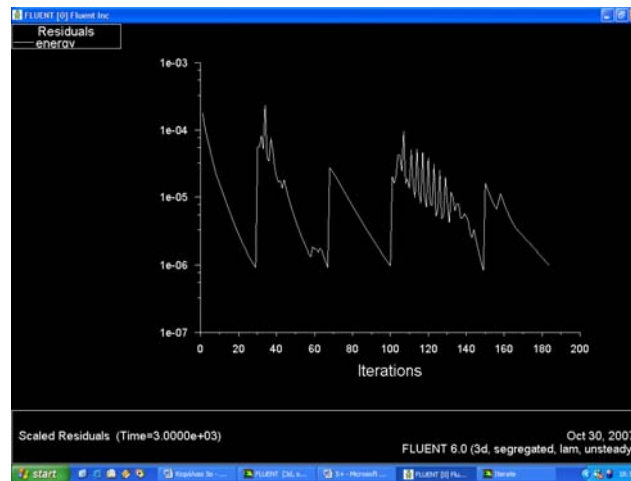
Τα υπολογιστικά σενάρια που ακολουθούν, δίνουν μια παραμετρική άποψη για τις μεταβολές που προκαλούνται για διάφορες τιμές των θερμοκρασιακών πεδίων στα άκρα του κυλίνδρου. Η αριθμητική επίλυση του φαινομένου γίνεται διατηρώντας τις παρακάτω παραμέτρους και συνθήκες σταθερές :

- Συντελεστές υποχαλάρωσης λαμβάνονται σε όλες τις περιπτώσεις ίσοι προς 0.3
- Το χρονικό βήμα που επιλέγεται θα αναφέρεται στον πίνακα πληροφοριών του εκάστοτε υπολογιστικού σεναρίου
- Η θερμοκρασιακή διαφορά στα άκρα του κυλίνδρου λαμβάνει τις εξής τιμές :
 $T_{left} = 400 K$, $T_{right} = 290 K$
- Η τιμή της σταθεράς ζώνης τήξης A_{mush} , θα λάβει την τιμή : $A_{mush} = 10^5$

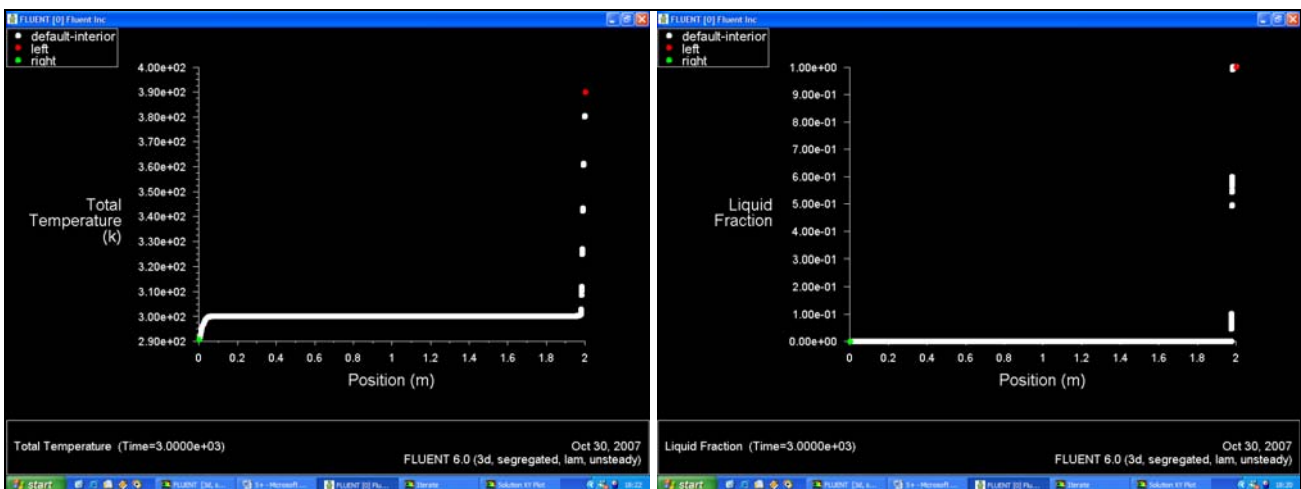
5.5.2 Υπολογιστικό σενάριο 5.1

Οι απαιτούμενες πληροφορίες για το υπολογιστικό σενάριο παρουσιάζονται στον πίνακα πληροφοριών που ακολουθεί. Θα απεικονιστούν τα διαγράμματα σύγκλισης των σταθμικών υπολοίπων στην εξίσωση της ενέργειας και κατόπιν τα διαγράμματα κατανομής της θερμοκρασίας και του κλάσματος τήξης κατά μήκος του κυλίνδρου.

Πίνακας πληροφοριών υπολογιστικού σεναρίου 5.1	
Χαρακτηριστικό μέγεθος	Τιμή επανάληψης
<i>Χρονικό βήμα</i>	600 sec
<i>Αριθμός χρονικών βημάτων</i>	5
<i>Αριθμός επαναλήψεων ανά χρονικό βήμα</i>	50
<i>$T_{initial}$</i>	300 K
<i>Κριτήριο σύγκλισης στη εξίσωση της ενέργειας</i>	10^{-6}



Σχήμα 5.26 Διαδικασία σύγκλισης σταθμικών υπολοίπων στην εξίσωση της ενέργειας για το υπολογιστικό σενάριο 5.1 (Συγκλίσεις μετά από 29,67,100,149,187 επαναλήψεις)

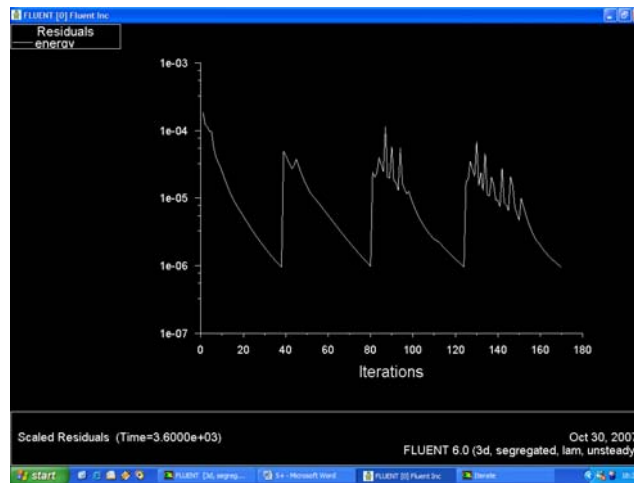


Σχήμα 5.27 Διαγράμματα Θερμοκρασίας και Κλάσματος τήξης συναρτήσει της μετατόπισης

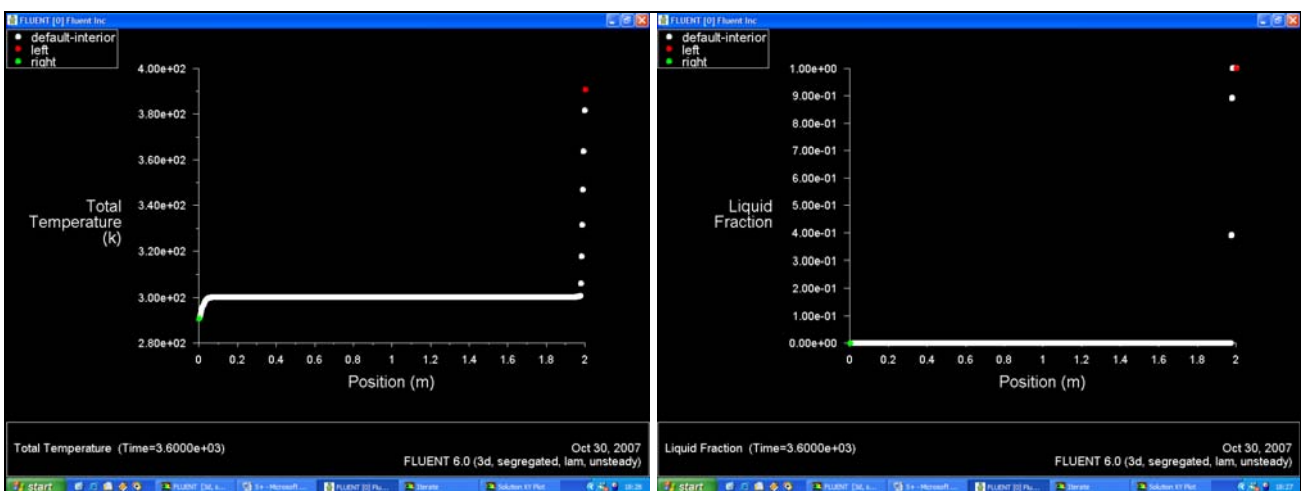
5.5.3 Υπολογιστικό σενάριο 5.2

Οι απαιτούμενες πληροφορίες για το υπολογιστικό σενάριο παρουσιάζονται στον πίνακα πληροφοριών που ακολουθεί. Θα απεικονιστούν τα διαγράμματα σύγκλισης των σταθμικών υπολοίπων στην εξίσωση της ενέργειας και κατόπιν τα διαγράμματα κατανομής της θερμοκρασίας και του κλάσματος τήξης κατά μήκος του κυλίνδρου.

Πίνακας πληροφοριών υπολογιστικού σεναρίου 5.2	
Χαρακτηριστικό μέγεθος	Τιμή επανάληψης
<i>Χρονικό βήμα</i>	900 sec
<i>Αριθμός χρονικών βημάτων</i>	4
<i>Αριθμός επαναλήψεων ανα χρονικό βήμα</i>	50
<i>$T_{initial}$</i>	300 K
<i>Κριτήριο σύγκλισης στη εξίσωση της ενέργειας</i>	10^{-6}



Σχήμα 5.28 Διαδικασία σύγκλισης σταθμικών υπολοίπων στην εξίσωση της ενέργειας για το υπολογιστικό σενάριο 5.2 (Συγκλίσεις μετά από 38,80,124,170 επαναλήψεις)

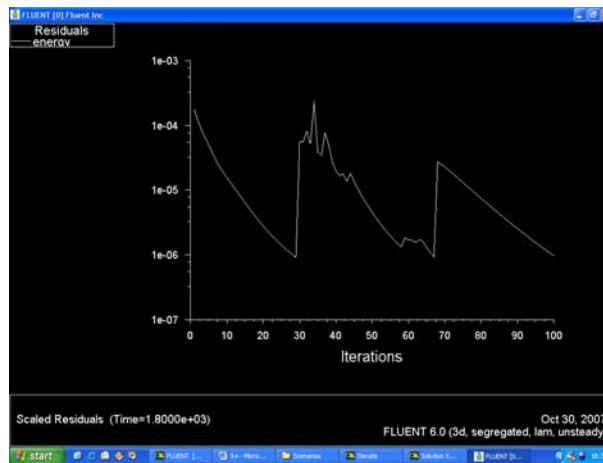


Σχήμα 5.29 Διαγράμματα Θερμοκρασίας και Κλάσματος τήξης συναρτήσει της μετατόπισης

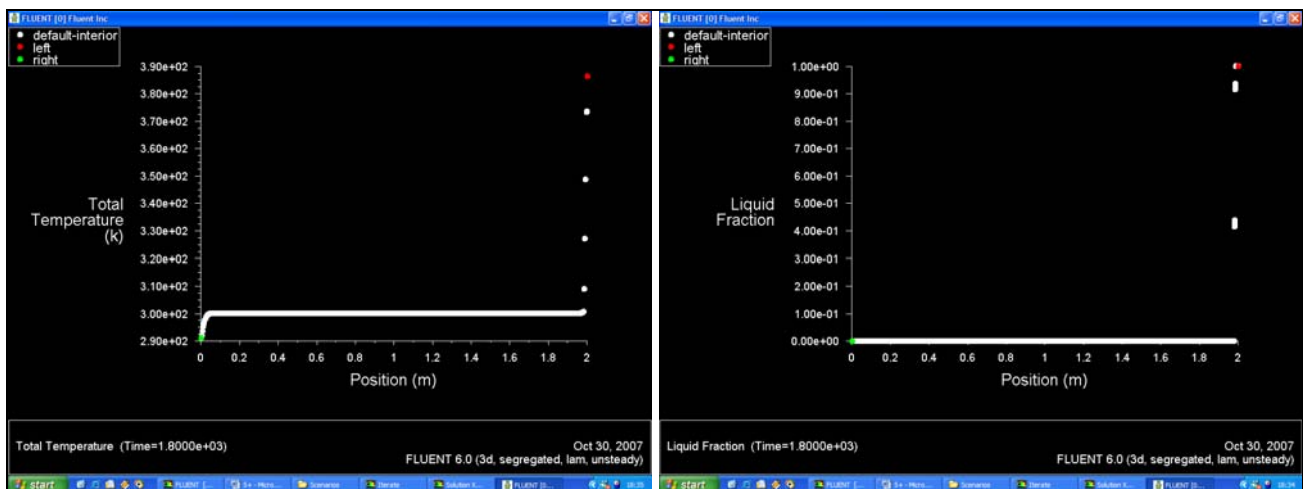
5.5.4 Υπολογιστικό σενάριο 5.3

Οι απαιτούμενες πληροφορίες για το υπολογιστικό σενάριο παρουσιάζονται στον πίνακα πληροφοριών που ακολουθεί. Θα απεικονιστούν τα διαγράμματα σύγκλισης των σταθμικών υπολοίπων στην εξίσωση της ενέργειας και κατόπιν τα διαγράμματα κατανομής της θερμοκρασίας και του κλάσματος τήξης κατά μήκος του κυλίνδρου.

Πίνακας πληροφοριών υπολογιστικού σεναρίου 5.3	
Χαρακτηριστικό μέγεθος	Τιμή επανάληψης
<i>Χρονικό βήμα</i>	600 sec
<i>Αριθμός χρονικών βημάτων</i>	3
<i>Αριθμός επαναλήψεων ανά χρονικό βήμα</i>	50
<i>T_{initial}</i>	300 K
<i>Κριτήριο σύγκλισης στη εξίσωση της ενέργειας</i>	10 ⁻⁶



Σχήμα 5.30 Διαδικασία σύγκλισης σταθμικών υπολοίπων στην εξίσωση της ενέργειας για το υπολογιστικό σενάριο 5.3 (Συγκλίσεις μετά από 29,67,100 επαναλήψεις)

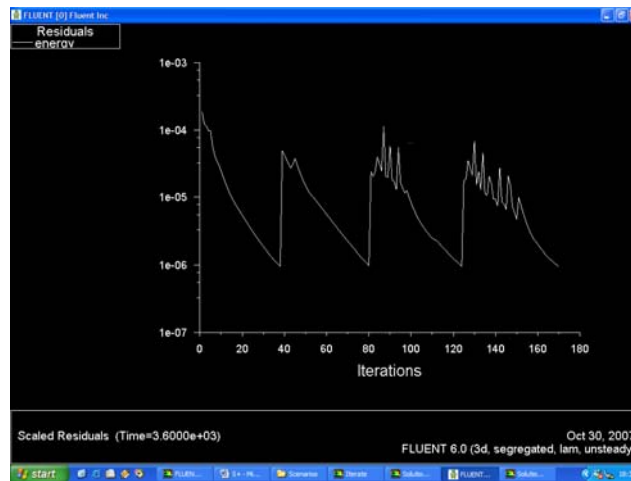


Σχήμα 5.31 Διαγράμματα Θερμοκρασίας και Κλάσματος τήξης συναρτήσει της μετατόπισης

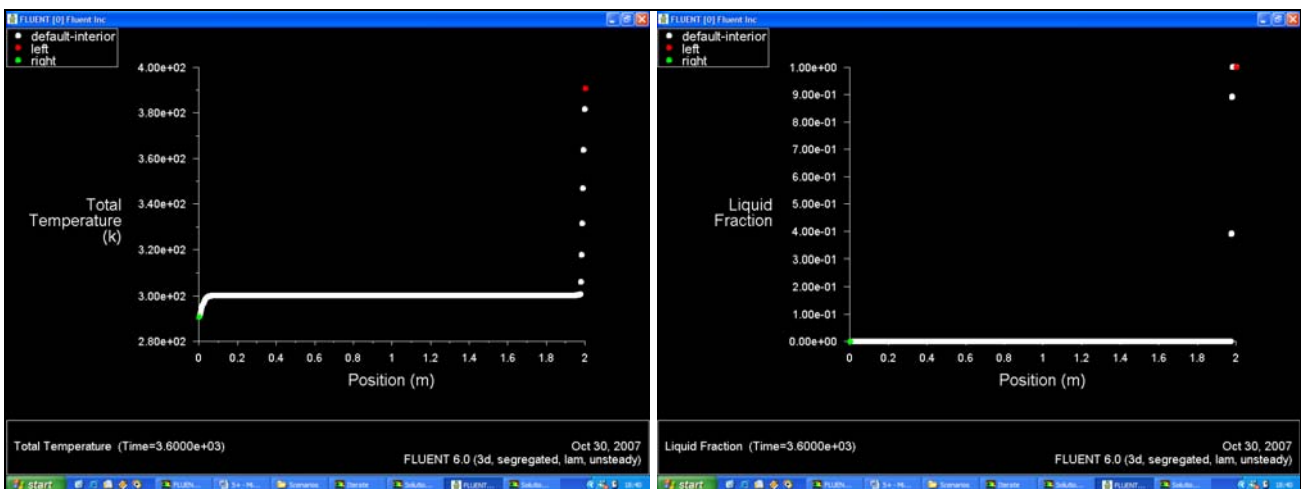
5.3.5 Υπολογιστικό σενάριο 5.4

Οι απαιτούμενες πληροφορίες για το υπολογιστικό σενάριο παρουσιάζονται στον πίνακα πληροφοριών που ακολουθεί. Θα απεικονιστούν τα διαγράμματα σύγκλισης των σταθμικών υπολοίπων στην εξίσωση της ενέργειας και κατόπιν τα διαγράμματα κατανομής της θερμοκρασίας και του κλάσματος τήξης κατά μήκος του κυλίνδρου.

Πίνακας πληροφοριών υπολογιστικού σεναρίου 5.4	
Χαρακτηριστικό μέγεθος	Τιμή επανάληψης
<i>Χρονικό βήμα</i>	900 sec
<i>Αριθμός χρονικών βημάτων</i>	4
<i>Αριθμός επαναλήψεων ανά χρονικό βήμα</i>	100
<i>$T_{initial}$</i>	300 K
<i>Κριτήριο σύγκλισης στη εξίσωση της ενέργειας</i>	10^{-6}



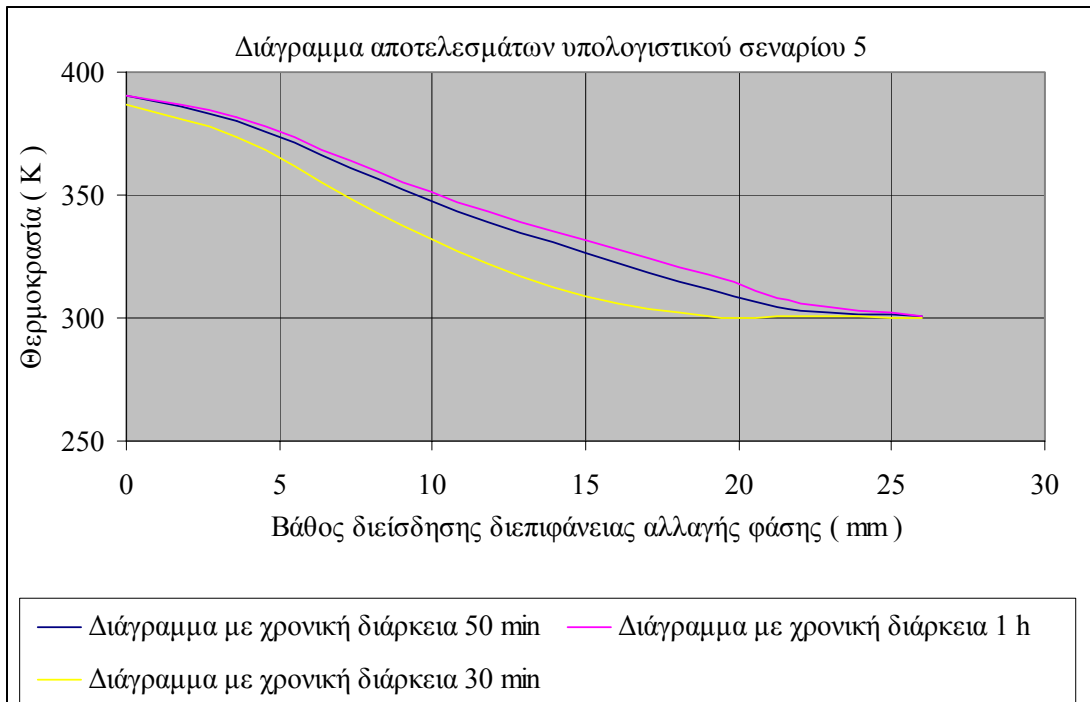
Σχήμα 5.30 Διαδικασία σύγκλισης σταθμικών υπολοίπων στην εξίσωση της ενέργειας για το υπολογιστικό σενάριο 5.4 (Συγκλίσεις μετά από 38,80,124,170 επαναλήψεις)



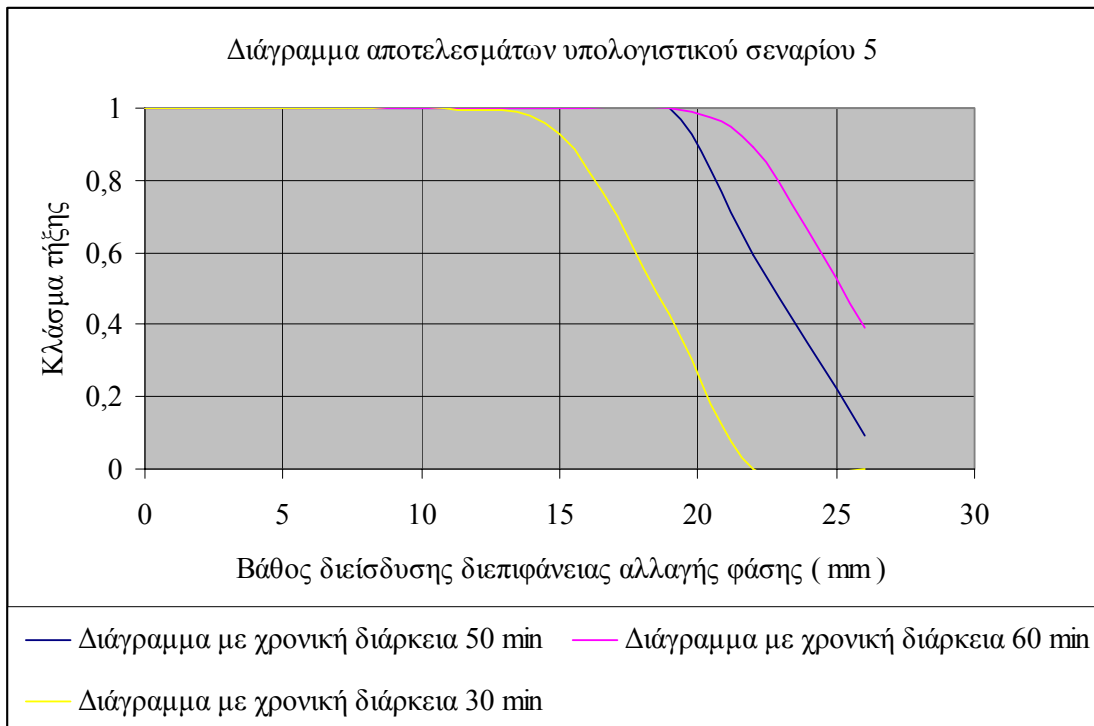
Σχήμα 5.31 Διαγράμματα Θερμοκρασίας και Κλάσματος τήξης συναρτήσει της μετατόπισης

5.5.6 Σχολιασμός αποτελεσμάτων

Από τα αποτελέσματα που προέκυψαν από τις επαναληπτικές διαδικασίες, παρατηρήσαμε ότι όσο αυξάνεται το χρονικό βήμα και ο αριθμός των χρονικών βημάτων, τόσο αυξάνει και η εξέλιξη του φαινομένου στο χρόνο. Ενδεικτικά για χρονικό διάστημα $\frac{1}{2}$ h το βάθος διείσδυσης της επιφάνειας αλλαγής φάσης υπολογίζεται περίπου στα 18mm ενώ στη 1 h στα 25 mm . Τα αναλυτικά αποτελέσματα κατά περίπτωση παρουσιάζονται στον Πιν. 5.5 και στα διαγράμματα Δ. 5.6 & Δ. 5.7 που ακολουθούν :



Διάγραμμα 5.6. Γραφική απεικόνιση αποτελεσμάτων υπολογιστικού σεναρίου 5.5,
 $T=f(x)$



Διάγραμμα 5.7. Γραφική απεικόνιση αποτελεσμάτων υπολογιστικού σεναρίου 5.5,
 $\beta=f(x)$

Θερμοκρασιακή διαφορά	Υπολογιστικό σενάριο 5.1							
Τοπικό μήκος του κυλίνδρου (m)	2000	1996.4	1992.7	1989.2	1985.5	1981.9	1978.3	1974.7
Επικρατούσα θερμοκρασία (K)	390.25	380.25	361.12	343.1	326.52	311.58	302.57	300.55
Κλάσμα τήξης	1	1	1	1	1	1	0.5916	0.0916
Βάθος εισχώρησης διεπιφάνειας αλλαγής φάσης (mm) : ≈ 25 mm								

Θερμοκρασιακή διαφορά	Υπολογιστικό σενάριο 5.2							
Τοπικό μήκος του κυλίνδρου (m)	2000	1996.4	1992.7	1989.2	1985.5	1981.9	1978.3	1974.7
Επικρατούσα θερμοκρασία (K)	390.7	381.54	363.7	346.86	331.46	317.68	305.94	300.61
Κλάσμα τήξης	1	1	1	1	1	1	0.8917	0.3911
Βάθος εισχώρησης διεπιφάνειας αλλαγής φάσης (mm) : ≈ 25 mm								

Θερμοκρασιακή διαφορά	Υπολογιστικό σενάριο 5.3							
Τοπικό μήκος του κυλίνδρου (m)	2000	1996.4	1992.7	1989.2	1985.5	1981.9	1978.3	1974.7
Επικρατούσα θερμοκρασία (K)	386.4	373.4	348.76	327.13	308.92	300.62	300.41	300.32
Κλάσμα τήξης	1	1	1	1	0.9269	0.4269	0	0
Βάθος εισχώρησης διεπιφάνειας αλλαγής φάσης (mm) : \approx mm								

Θερμοκρασιακή διαφορά	Υπολογιστικό σενάριο 5.4							
Τοπικό μήκος του κυλίνδρου (m)	2000	1996.4	1992.7	1989.2	1985.5	1981.9	1978.3	1974.7
Επικρατούσα θερμοκρασία (K)	390.7	381.55	363.67	346.86	331.46	317.68	300.94	300.61
Κλάσμα τήξης	1	1	1	1	1	1	0.8912	0.3912
Βάθος εισχώρησης διεπιφάνειας αλλαγής φάσης (mm) : ≈ 25 mm								

Πίνακας 5.5. Συγκεντρωτικά αποτελέσματα υπολογιστικών σεναρίων με βάση την επιλογή χρονικού βήματος

5.6 Σχόλια – Συμπεράσματα

Η παραμετρική προσέγγιση του φαινομένου στερεοποίησης και τήξης του υλικού αλλαγής φάσης, σε γενικές γραμμές παρουσιάζει την ακόλουθη εικόνα :

- Η σταθερά ζώνης τήξης δεν επέφερε ουσιαστικά αποτελέσματα στην εξέλιξη του φαινομένου, και στις δυο περιπτώσεις όπου πραγματοποιηθήκαν προσομοιώσεις τα αποτελέσματα για την μετακίνηση του μετώπου αλλαγής φάσης ήταν παρόμοια.
- Οι συντελεστές υποχαλάρωσης επηρέασαν την ταχύτητα σύγκλισης του φαινομένου και όχι ιδιαίτερα τη διαδικασία της μετακίνησης της διεπιφάνειας αλλαγής φάσης. Παρατηρήθηκε ότι αλλαγές στους συντελεστές υποχαλάρωσης του κλάσματος τήξης και ενέργειας προκαλούν μεταβολές στην ταχύτητα σύγκλισης του φαινομένου τήξης και στερεοποίησης.
- Η θερμοκρασία που επικρατούσε στα άκρα του κυλίνδρου. Όπως αναμενόταν άλλωστε, είχε ιδιαίτερο ενδιαφέρον καθώς όσο αυξανόταν η θερμοκρασιακή διαφορά τόσο η επιφάνεια αλλαγής φάσης μετακινούνταν σε μεγαλύτερο βάθος.
- Τέλος το χρονικό βήμα επέδρασε καταλυτικά στην διάδοση της διεπιφάνειας αλλαγής φάσης καθώς όσο αυξανόταν ο συνολικός χρόνος παραμονής σε δεδομένες θερμοκρασιακές συνθήκες τόσο εισχωρούσε η διεπιφάνεια στο βάθος του κυλίνδρου.

Τα παραπάνω στοιχεία για το βάθος εισχώρησης της επιφάνειας αλλαγής φάσης στερεού – υγρού για κάθε περίπτωση παρουσιάζονται στον Πιν. 5.6, που ακολουθεί :

Υπολογιστικό σενάριο	Ειδικές επικρατούσες συνθήκες	Βάθος μετατόπισης διεπιφάνειας αλλαγής φάσης (mm)
Σταθερά ζώνης τήξης A_{mush}	$\Delta T = 110 \text{ K}$ ($T_{left} = 400\text{K} \ \& \ T_{right} = 290\text{K}$)	10.5
	$\Delta T = 50 \text{ K}$ ($T_{left} = 340\text{K} \ \& \ T_{right} = 290\text{K}$)	9.5
Συντελεστές υποχαλάρωσης	$\alpha_{energy} = \{0.2-0.6\} \ \& \ \alpha_{liquid \ fraction} = \{0.2-0.6\}$	7 - 8
Θερμοκρασιακή διαφορά στα άκρα του κυλίνδρου	$\Delta T = 210 \text{ K}$ ($T_{left} = 500\text{K} \ \& \ T_{right} = 290\text{K}$)	14.5
	$\Delta T = 0 \text{ K}$ ($T_{left} = 400\text{K} \ \& \ T_{right} = 400\text{K}$)	10.85
	$\Delta T = 0 \text{ K}$ ($T_{left} = 600\text{K} \ \& \ T_{right} = 600\text{K}$)	18.5
	$\Delta T = 400 \text{ K}$ ($T_{left} = 600\text{K} \ \& \ T_{right} = 200\text{K}$)	14.5
Χρονικό βήμα	1 h	25
	½ h	18.1

Πίνακας 5.6. Αποτελέσματα παραμετρικής προσέγγισης φαινομένου σχετικά με το βάθος διείσδυσης της επιφάνειας αλλαγής φάσης

Βιβλιογραφία

Επιλεγμένη ξενόγλωσση βιβλιογραφία από δημοσιεύσεις :

1. V. R. Voller, « An implicit enthalpy solution for phase change problems: with application to a binary alloy solidification », Mineral Resources Research Center, University of Minnesota, U.S.A. , January 1986
2. M. Costa, D. Buddhi, A. Oliva, « Numerical simulation of a latent heat thermal storage system with enhanced heat conduction », Laboratori de Termotecnia, Department de Maquines i Motors Termics, Barcelona, Spain, April 1996
3. V. Shatikian, G. Ziskind, R. Letan, « Numerical investigation of a P.C.M.- based heat sink with internal fins », Heat Transfer Laboratory, Department of Mechanical Engineering, Pearlstone Center for Aeronautical Studies, Ben-Gurion University of the Negev, Israel, December 2003
4. E. Assis, L. Katsman, G. Ziskind, R. Letan « Numerical and experimental study of melting in a spherical shell », Heat Transfer Laboratory, Department of Mechanical Engineering, Pearlstone Center for Aeronautical Studies, Ben-Gurion University of the Negev, Israel, January 2006
5. Belen Zalba, Jose Marina, Luisa F. Cabeza, Harald Mehling, « Review on thermal energy storage with phase change: materials, heat transfer analysis and applications », October 2002

Εγχειρίδια προγραμμάτων :

6. Εγχειρίδιο οδηγιών Fluent 6.1
7. Εγχειρίδιο οδηγιών Gambit 2.2

Επιλεγμένη ελληνική βιβλιογραφία :

9. Γεώργιος Μπεργελές, « Υπολογιστική Ρευστομηχανική », Εκδόσεις ΣΥΜΕΩΝ, Αθήνα 2006
10. Κίμων Α. Αντωνόπουλος, « Υπολογιστικές μέθοδοι φαινομένων μεταφοράς », μέρος πρώτο, Εκδόσεις Ε.Μ.Π., Αθήνα 2005
11. Χ. Τζιβανίδης, « Σημειώσεις για το μάθημα Θερμική Συμπεριφορά Κτιρίων », Σημειώσεις Ε.Μ.Π., σχολή Μηχανολόγων Μηχανικών, Τομέας Θερμότητας, Μάιος 2006

Επιλεγμένες διπλωματικές εργασίες :

12. Καλλιακούδη Κωνσταντίνα, « Θερμικές εφαρμογές υλικών αλλαγής φάσης » Διπλωματική εργασία Ε.Μ.Π., σχολή Μηχανολόγων Μηχανικών, Τομέας Θερμότητας, Σεπτέμβριος 2006
13. Μπούρας Ιωάννης, « Προσομοίωση συμπυκνωτή ψυκτικής εγκατάστασης με το εμπορικό πακέτο Fluent » Διπλωματική εργασία Ε.Μ.Π., σχολή Μηχανολόγων Μηχανικών, Τομέας Θερμότητας

Διαδικτυακοί τόποι :

1. « <http://202.41.85.84/doc/gambit2.2/index.htm> » , Πληροφορίες για το Gambit
2. « http://www.thermaflo.com/ifmat_phase.shtml » , Γενικές πληροφορίες για P.C.M.
3. « <http://freespace.virgin.net/m.eckert/index.htm> » , Γενικές πληροφορίες για P.C.M.
4. « <http://www.rubitherm.de/english/index.htm> » , Rubitherm, Εταιρία που ασχολείται με τα P.C.M.
5. « <http://www.sciencedirect.com> » , Μηχανή αναζήτησης επιστημονικών άρθρων
6. « <http://www.springerlink.com> » , Μηχανή αναζήτησης επιστημονικών άρθρων